

System TripleTOF® 5600/5600+

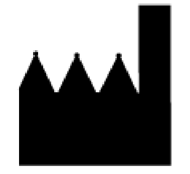
Systemhandbuch



RUO-IDV-05-1193-DE-A

Juli 2014

Nur für Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei Diagnoseverfahren.



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPORE 739256

Inhalt

Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb 1

Hinweis: Lesen Sie vor der Bedienung des Systems alle Abschnitte dieses Handbuchs sorgfältig.

Dieser Abschnitt enthält allgemeine sicherheitsrelevante Informationen und stellt Informationen zur Einhaltung gesetzlicher Vorschriften bereit. Es beschreibt ebenfalls mögliche Gefahren und die damit verbundenen Warnungen für das System und die Vorsichtsmaßnahmen, die getroffen werden sollten, um Gefahren zu minimieren.

Bitte beachten Sie zusätzlich zu diesem Abschnitt auch *Gefahrensymbole auf Seite 14*. Dort finden Sie Informationen über die Symbole und Konventionen, die im Zusammenhang mit dem System in der Laborumgebung und in dieser Dokumentation verwendet werden. Im *Site Planning Guide* finden Sie Anforderungen an den Standort, einschließlich der Anforderungen an Netzversorgung, Quellenabgas, Lüftung, Luft, Stickstoff und Vakuumpumpe.

Allgemeine Informationen zur Sicherheit

Um Personenschäden oder Schäden am System zu vermeiden, lesen, verstehen und beachten Sie alle Sicherheitsvorkehrungen und Warnhinweise in diesem Dokument sowie die Etiketten am Massenspektrometer. Diese Etiketten zeigen international anerkannte Symbole. Die Nichtbeachtung dieser Warnhinweise kann zu schweren Verletzungen führen.

Diese Sicherheitsinformationen sollen Vorschriften auf Bundes-, Landes- oder Bezirks- und regionaler Ebene zu Sicherheit, Gesundheit und Umweltschutz (SGU) ergänzen. Diese angesprochenen Informationen betreffen systemrelevante Sicherheitsfragen in Bezug auf den Betrieb des Massenspektrometers. Es werden nicht alle Sicherheitsmaßnahmen angesprochen, die beachtet werden sollten. Letztendlich sind der Benutzer und die Organisation für die Einhaltung der Bundes-, Landes-, Bezirks- und regionalen Umwelt- und Sicherheitsvorschriften und für die Aufrechterhaltung einer sicheren Laborumgebung verantwortlich.

Weitere Informationen finden Sie im entsprechenden Labor-Referenzmaterial und in den Betriebsanweisungen.

Einhaltung gesetzlicher Vorschriften

Dieses System entspricht den in diesem Abschnitt aufgeführten Normen und Vorschriften. Entsprechende Aufkleber wurden am System angebracht.

Australien und Neuseeland

- **Elektromagnetische Interferenz** – AS/NZ CISPR 11 (Klasse A)
- **Sicherheit** – AS/NZ 61010-1 und IEC 61010-2-061

Kanada

- **Elektromagnetische Interferenz** – CAN/CSACISPR11. Dieses ISM-Gerät entspricht der kanadischen Norm ICES-001.
- **Sicherheit** – CAN/CSA C22.2 Nr. 61010-1 und CAN/CSA C22.2 Nr. 61010-2-061

Europa

- **Elektromagnetische Interferenz** – Richtlinie zur elektromagnetischen Verträglichkeit 2004/108/EG, wie in diesen Normen umgesetzt:
  - EN 55011 (Klasse A)
  - EN 61326-1
- **Sicherheit** – Niederspannungsrichtlinie 2006/95/EG, wie in diesen Normen umgesetzt:
  - EN 61010-1
  - EN 61010-2-061
- **WEEE** – Richtlinie 2002/96/EG über Elektro- und Elektronik-Altgeräte, wie in EN 40519 umgesetzt

USA

- **Elektromagnetische Interferenz, FCC Teil 15, Klasse A** – Dieses Gerät wurde getestet und entspricht den Grenzwerten für Digitalgeräte der Klasse A gemäß Teil 15 der Einhaltungsvorschriften der FCC (Federal Communications Commission).

  Diese Grenzwerte sollen einen angemessenen Schutz vor schädlichen Interferenzen bieten, wenn das Gerät kommerziell eingesetzt wird. Dieses Gerät erzeugt, verwendet und kann Hochfrequenzenergie abstrahlen und kann, bei unsachgemäßer Installation und Verwendung entgegen der Betriebsanleitung, Störungen im Funkverkehr verursachen.

  Der Betrieb dieses Gerätes führt in einem Wohngebiet wahrscheinlich zu Störungen und diese Störungen müssen auf Ihre Kosten beseitigt werden. Nicht ausdrücklich vom Hersteller genehmigte Änderungen oder Modifikationen können zum Entzug der Betriebserlaubnis führen.
- **Sicherheit** – UL 61010-1 und IEC 61010-2-061

International Normen

- Elektromagnetische Verträglichkeit – IEC 61326-1 und CEI/IEC CISPR 11 Klasse A
- **Sicherheit** – IEC 61010-1 und IEC 61010-2-061

Weitere Informationen finden Sie in der dem System beigefügten Konformitätserklärung.

Elektrische Vorsichtsmaßnahmen

Stromversorgung



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Verwenden Sie ausschließlich qualifiziertes Personal für die Installation aller elektrischen Ausrüstungen und Vorrichtungen und stellen Sie sicher, dass alle Anlagen den örtlichen Vorschriften und Sicherheitsstandards entsprechen.

Für das Massenspektrometer, den optionalen Labortisch oder die Vakuumpumpe wird kein externer Transformator benötigt.

VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Massenspektrometer-Kiste oder Computerverpackungen nicht auspacken. Der Außendienstmitarbeiters (FSE) wird das Massenspektrometer zum Zeitpunkt der Installation entpacken und bewegen.

Weitere Informationen zu Spezifikationen für die elektrische Anlage finden Sie unter oder im *Site Planning Guide*.

Schutzleiter

Das Netz muss mit einem korrekt installierten Schutzleiter ausgestattet sein. Der Erdungs-Schutzleiter muss installiert oder von einer Elektrofachkraft überprüft werden, bevor das Massenspektrometer angeschlossen wird. Stellen Sie sicher, dass die Netzsteckdose zugänglich ist, damit das Gerät vom Netz getrennt werden kann.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Schutzleiter nicht unterbrechen! Durch eine Unterbrechung des Schutzleiters können Gefahren von der Anlage ausgehen.

Chemische Vorsichtsmaßnahmen

- Bestimmen Sie, welche Chemikalien im System vor dem Einsatz und der regelmäßigen Wartung verwendet wurden. Siehe Sicherheitsdatenblätter für Vorsichtsmaßnahmen zur Erhaltung der Gesundheit und Sicherheit, die im Zusammenhang mit Chemikalien beachtet werden müssen.
- Arbeiten Sie in einem gut belüfteten Bereich.
- Tragen Sie immer die Ihnen zugewiesene persönliche Schutzausrüstung, einschließlich puderfreier Handschuhe, einer Schutzbrille und einem Laborkittel.
- Befolgen Sie die vorgeschriebenen Sicherheitsverfahren für elektrische Arbeiten.
- Vermeiden Sie Zündquellen bei Arbeiten mit brennbaren Materialien, wie z.B. Isopropanol, Methanol und anderen brennbaren Lösungsmitteln.

- Lassen Sie in der Verwendung und Entsorgung von Chemikalien Vorsicht walten. Es besteht ein potenzielles Risiko für Personenschäden, wenn die ordnungsgemäßen Verfahren zur Handhabung und Entsorgung von Chemikalien nicht befolgt werden.
- Bei der Reinigung Hautkontakt mit Chemikalien vermeiden und Hände nach Gebrauch waschen.
- Befolgen Sie alle örtlichen Vorschriften für den Umgang mit biogefährlichen, giftigen oder radioaktiven Stoffen sowie für deren Lagerung und Entsorgung.

Sichere Systemflüssigkeiten

Die folgenden Flüssigkeiten können mit dem System sicher verwendet werden. Informationen zu sicheren Reinigungslösungen finden Sie unter *Service- und Wartungsinformationen auf Seite 91*.

VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Verwenden Sie keine anderen Flüssigkeiten, bis AB SCIEX bestätigt, dass dadurch keine Gefahren entstehen. Diese Liste ist nicht vollständig.

- **Organische Lösungsmittel**
  - Acetonitril, MS-Qualität; bis zu 100 %
  - Methanol, MS-Qualität; bis zu 100 %
  - Isopropanol; bis zu 100 %
  - Wasser, HPLC-Qualität oder höher; bis zu 100 %
- **Puffer**
  - Ammoniumacetat; weniger als 1 %
  - Ammoniumformiat; weniger als 1 %
- **Säuren und Basen**
  - Ameisensäure; weniger als 1 %
  - Essigsäure; weniger als 1 %
  - Trifluoressigsäure; (TFA) weniger als 1 %
  - Heptafluorbuttersäure; (HFBA) weniger als 1 %
  - Ammoniak/Ammoniumhydroxid; weniger als 1 %

Vorsichtsmaßnahmen für die Lüftung

Bei der Entlüftung der Abgase und der Entsorgung von Abfällen müssen alle Bundes-, Landes-, Bezirks- und lokalen Gesundheits- und Sicherheitsvorschriften eingehalten werden. Verwenden Sie das System im Innenbereich eines Labors, das den für das System empfohlenen Umgebungsbedingungen im *Site Planning Guide* entspricht.

Die Ionenquellenabgasanlage des Massenspektrometers und die Vakuumpumpe müssen, wie im *Site Planning Guide* für das System empfohlen, entweder mit einer externen Abzugshaube oder einer externen Entlüftung entlüftet werden.




WARNHINWEIS! Toxisch-chemische Gefahren oder Biogefährdung. Achten Sie darauf, Abgase über eine Laborabzugshaube oder eine dafür vorgesehene Entlüftung zu entlüften, und sorgen Sie dafür, dass die Abgasschläuche mit Schellen gut befestigt sind. Die Verwendung des Massenspektrometers ohne ausreichende Belüftung mit Außenluft kann gesundheitsschädlich sein und zu schweren Verletzungen führen.




WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Stellen Sie sicher, dass das Massenspektrometer an die Entlüftung angeschlossen ist. Das System sollte nur in einer gut belüfteten Laborumgebung entsprechend den örtlichen Vorschriften und mit einem den durchgeführten Arbeiten entsprechenden Luftaustausch betrieben werden. Empfohlen sind in Laboratorien 4 bis 12 Luftwechsel pro Stunde.




WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Betreiben Sie das Massenspektrometer nicht, wenn die Quellenabgas- und Vakuumpumpen-Abgasschläuche nicht richtig an das Laborentlüftungssystem angeschlossen sind. Bei bestimmten, während der Bedienung des Massenspektrometers erforderlichen, Verfahren können Gase in den Abgasstrom eingeleitet werden. Kontrollieren Sie regelmäßig den Abgasschlauch, um sicherzustellen, dass keine Undichtigkeiten vorhanden sind.




WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Verwenden Sie die Ionenquelle nur, wenn Sie Kenntnisse über die ordnungsgemäße Verwendung, Eingrenzung und Entsorgung von innerhalb der Ionenquelle verwendeten giftigen oder schädlichen Materialien haben und darin geschult wurden. Verwenden Sie die Ionenquelle nicht mehr, wenn das Fenster gesprungen oder beschädigt ist, und wenden Sie sich an einen AB SCIEX Außendienstmitarbeiter. Alle giftigen oder schädlichen Stoffe, die dem Gerät zugeführt werden, sind in der Ionenquelle und im Abgas vorhanden. Befolgen Sie bei der Entsorgung von scharfen und spitzen Gegenständen die vorhandenen Sicherheitsvorschriften Ihres Labors.

Umweltschutzmaßnahmen

Verwenden Sie qualifiziertes Personal für die Installation von Strom-, Heizungs-, Lüftungs- und Sanitäranschlüssen und -zubehör. Stellen Sie sicher, dass alle Installationen die regionalen Bestimmung und

Vorschriften zur Biogefährdung befolgen. Für weitere Informationen über erforderliche Umgebungsbedingungen für das System beziehen sich bitte auf den *Site Planning Guide*.



GEFAHR! Explosionsgefahr: Betreiben Sie das System nicht in einer Umgebung mit explosiven Gasen. Das System ist nicht für den Betrieb in explosionsgefährdeten Umgebungen vorgesehen.



WARNHINWEIS! Biogefährdung. Bei der Verwendung von biogefährlichem Material halten Sie sich bei der Beurteilung, Kontrolle und Beseitigung von Gefahren immer an die örtlichen Vorschriften. Das Massenspektrometer oder eines seiner Teile ist nicht dafür bestimmt, als biologisches Sicherheitssystem genutzt zu werden.

VORSICHT: Mögliche Masseverschiebung. Sorgen Sie für eine stabile Umgebungstemperatur. Wenn sich die Temperatur um mehr als 2 °C ändert, werden die Auflösung und die Massenkalibrierung beeinträchtigt.

Elektromagnetische Umgebung

VORSICHT: Möglicherweise fehlerhaftes Ergebnis. Verwenden Sie dieses Gerät nicht in der Nähe von Quellen starker elektromagnetischer (EM) Strahlung (z. B. nicht abgeschirmte, beabsichtigte HF-Quellen), da die EM-Strahlung die ordnungsgemäße Funktion beeinträchtigen und zu einem fehlerhaften Ergebnis führen könnte.

Stellen Sie sicher, dass eine angemessene elektromagnetische Umgebung für das Gerät aufrechterhalten wird, damit das Gerät in gewünschter Weise funktionieren kann.

In einer häuslichen Umgebung kann das Gerät zu Funkstörungen führen. In diesem Fall muss der Benutzer eventuell Maßnahmen ergreifen, um diese Störungen zu mindern. Beurteilen Sie die elektromagnetische Umgebung vor Inbetriebnahme des Geräts.

Nicht ausdrücklich vom Hersteller genehmigte Änderungen oder Modifikationen können zum Entzug der Betriebserlaubnis führen.

Stilllegung und Entsorgung (Abfall, Elektro- und Elektronikgeräte)

Dekontaminieren Sie das System vor der Stilllegung gemäß den örtlichen Vorschriften. Befolgen Sie den "Red Tag"-Prozess von AB SCIEX und füllen Sie ein Instrumentendekontaminierungsformular für die Rückgabe von Geräten und Bauteilen aus.

Trennen und recyceln Sie bei Stilllegung des Systems verschiedene Materialien gemäß nationalen und örtlichen Umweltvorschriften. Siehe *Lagerung und Handhabung auf Seite 100*.

Bauteile oder Baugruppen der Anlage, einschließlich Computer-Teile, dürfen nicht als unsortierter Hausmüll entsorgt werden. Befolgen Sie die örtlichen kommunalen Abfallverordnungen für die ordnungsgemäße Entsorgung, damit Umweltbelastungen durch Elektro- und Elektronikgeräte-Abfall reduziert wird. Für die

sichere Entsorgung dieser Maschine kontaktieren Sie bitte ein lokales Kundenservice-Büro für die kostenlose Abholung und Recycling von Geräten.

Hinweis: AB SCIEX nimmt keine Systemrückgaben ohne ausgefülltes Dekontaminationsformular an.

Qualifiziertes Personal

Nur qualifiziertes AB SCIEX-Personal darf die Anlage installieren und warten. Nach der Installation des Systems verwendet der Außendienstmitarbeiter (Field Service Employee - FSE) die *Customer Familiarization Checklist*, um den Kunden in der Bedienung, Reinigung und grundlegenden Wartung der Anlage zu schulen.

Die Anlage darf nur von Personal gewartet werden, das vom Hersteller dazu qualifiziert wurde. Eine verantwortliche Person des Labors kann während der Installation mit den Verfahren vertraut gemacht werden, die der qualifizierte Wartungstechniker (QMP) durchführt.

Kundenschulung und Dokumentation

Weitere Informationen zur Schulung finden Sie auf der AB SCIEX Website (www.absciex.com/training).

Der *Site Planning Guide* wird dem Kunden vor der Installation zur Verfügung gestellt. Die Handbücher und Anleitungen für die Analyst® TF Software werden automatisch mit der Software installiert und sind im Startmenü verfügbar: **All Programs > AB SCIEX > Analyst TF** . Handbücher für das Massenspektrometer befinden sich auf der *Hardware Documentation DVD*. Handbücher für die Ionenquelle befinden sich auf der *Ion Source Customer Reference CD*. Eine vollständige Liste der verfügbaren Dokumentation finden Sie in der Hilfe. Um die **Analyst TF** Software-Hilfe anzuzeigen, drücken Sie **F1.**

Verwendung und Änderungen an den Geräten

Verwenden Sie das Gerät nur im Innenbereich in einem Labor, das den empfohlenen Umweltbedingungen im *Site Planning Guide* entspricht.

Wenn das System in einer Umgebung oder in einer Weise verwendet wird, die nicht den Vorschriften des Herstellers entspricht, kann der im Gerät eingebaute Schutz beeinträchtigt werden.

Unautorisierte Veränderungen oder Bedienungen des Systems können zu Personenschäden und Schäden am Gerät und zum Erlöschen der Garantie führen. Wenn das System unter Umgebungsbedingungen, die über oder unter dem empfohlenen Bereich liegen, oder mit nicht genehmigten Änderungen betrieben wird, können fehlerhafte Daten erzeugt werden. Informationen zur Wartung des Systems erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).



WARNHINWEIS! Gefahr für Personenschäden: Verwenden Sie ausschließlich von AB SCIEX empfohlene Teile. Die Verwendung von nicht von AB SCIEX empfohlenen Teilen oder für Zwecke, die nicht dem empfohlenen Verwendungszweck entsprechen, kann zu einem Risiko für den Benutzer führen oder die Systemleistung beeinträchtigen. Wenn das Gerät in einer Umgebung oder in einer Weise verwendet wird, die nicht der Beschreibung von AB SCIEX entspricht, kann der im Gerät eingebaute Schutz beeinträchtigt werden.

Gefahrensymbole 2

In diesem Abschnitt werden die Gefahrensymbole und Konventionen beschrieben, die im Zusammenhang mit dem System in der Laborumgebung und in dieser Dokumentation verwendet werden.

Symbole für Gesundheitsschutz und Sicherheit am Arbeitsplatz

Dieser Abschnitt beschreibt einige Symbole für Gesundheitsschutz und Sicherheit am Arbeitsplatz, die in dieser Dokumentation und in der Laborumgebung verwendet werden.

Tabelle 2-1 Chemische Gefahrensymbole

Warnzeichen	Definition
	Biogefährdung
	Explosionsgefahr
	Toxisch-chemische Gefahren

Tabelle 2-2 Warnsymbole für elektrische Gefahren

Warnzeichen	Definition
	Stromschlaggefahr

Tabelle 2-3 Warnhinweise für Gefahren durch mit Druck beaufschlagtem Gas

Warnzeichen	Definition
	Gefahren durch Druckgase

Tabelle 2-4 Mechanische Gefahrensymbole

Warnzeichen	Definition
	Gefahr durch heiße Oberfläche
	Gefahr beim Heben schwerer Gegenstände
	Gefahr von Stich- und Schnittverletzungen
	Gefährdung durch ionisierende oder radioaktive Strahlung

Symbole, Anzeigen und Beschriftungen: Verpackung

Tabelle 2-5 Etiketten auf den Versandmaterialien des Massenspektrometers

Beschriftung/Symbol	Definition
oder	Neigungsanzeige Zeigt an, ob der Behälter gekippt oder falsch behandelt wurde. Notieren Sie gegebenenfalls auf dem Lieferschein wenn die Anzeiger ein übermässiges Kippen der Transportkiste anzeigen und untersuchen Sie den Transportbehälter auf Beschädigungen. Etwaige Ansprüche aufgrund von Kippen erfordern eine Aufzeichnung.

Tabelle 2-5 Etiketten auf den Versandmaterialien des Massenspektrometers (Fortsetzung)

Beschriftung/Symbol	Definition
	Aufrecht halten.
IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING oder IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING An Impact-O-Graph IMPACT INDICATOR guards sensitive products in this container. If the indicator is tripped, this container has been dropped or otherwise mishandled. Make note on bill of lading and check for damage.	Stoßanzeige Wenn die Anzeige ausgelöst wurde, wurde dieser Behälter fallen gelassen oder auf andere Weise falsch behandelt. Notieren Sie es auf dem Lieferschein und untersuchen Sie, ob Beschädigungen vorliegen.
IMPORTANT! RECORD ANY VISIBLE CRATE DAMAGE, INCLUDING TRIPPED "IMPACT INDICATOR" OR "TILT INDICATOR" ON THE WAYBILL BEFORE ACCEPTING SHIPMENT AND NOTIFY YOUR LOCAL AB SCIEX CUSTOMER SUPPORT ENGINEER IMMEDIATELY. DO NOT UNCRATE. CONTACT YOUR LOCAL CUSTOMER SUPPORT ENGINEER FOR UNCRATING AND INSTALLATION.	WICHTIG! DOKUMENTIEREN SIE VOR ANNAHME DER SENDUNG ALLE SICHTBAREN SCHÄDEN AN DER KISTE, DARUNTER AUCH ANZEICHEN FÜR MÖGLICHE STOSS- UND NEIGUNGSSCHÄDEN, AUF DEM FRACHTBRIEF UND BENACHRICHTIGEN SIE UMGEHEND DEN ZUSTÄNDIGEN KUNDENDIENSTTECHNIKER VON AB SCIEX. DIE KISTE NICHT AUSPACKEN. WENDEN SIE SICH ZWECKS AUSPACKEN UND INSTALLATION AN IHREN ZUSTÄNDIGEN KUNDENDIENSTTECHNIKER.
	Vor Nässe schützen.
	Zerbrechlich

Symbole, Anzeigen und Beschriftungen: Massenspektrometer

Siehe *Status-LED-Symbole auf Seite 23* für weitere Informationen.

Tabelle 2-6 Etiketten auf dem Massenspektrometer

Etikett	Definition
WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.	WARNUNG: Enthält keine vom Benutzer zu wartenden Teile. Wenden Sie sich zur Wartung an Fachpersonal. Bedienungsanleitung beachten.
	Das Gerät darf nicht im Hausmüll entsorgt werden.
	WARNUNG: Gefahr durch heiße Oberfläche.
	Bedienungsanleitung beachten.
	WARNUNG: Hochspannung. Stromschlaggefahr.
	Schutzleiter (Erde)
~	Wechselspannung
A	Ampere (Strom)
V	Volt (Spannung)
VA	Voltampere (Strom)
WARNING: "DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED"	WARNUNG: Nicht verwenden, ohne zunächst sicherzustellen, dass der Behälterdeckel gesichert ist. Dieser Warnhinweis erscheint auf der Quellenabgas-Abfallflasche.

Symbole und Konventionen der Dokumentation

Die folgenden Symbole und Konventionen werden im gesamten Handbuch verwendet.



GEFAHR! Gefahr bedeutet eine Handlung, die zu schweren Verletzungen oder zum Tod führen kann.



WARNHINWEIS! Eine Warnung weist auf Handlungen hin, die zu Verletzungen führen könnten, wenn Vorsichtsmaßnahmen nicht befolgt werden.

VORSICHT: Ein Vorsichthinweis weist auf Handlungen hin, die zu Schäden oder Beschädigungen am System oder Datenverlust führen können, wenn Vorsichtsmaßnahmen nicht befolgt werden.

Hinweis: Ein Hinweis betont wichtige Informationen in einem Verfahren oder in einer Beschreibung.

Tipp! Ein Tipp gibt nützliche Informationen, die dabei helfen, im Text beschriebene Techniken und Verfahren für bestimmte Bedürfnisse anzuwenden, und zeigt Tastenkombinationen, ist aber für die Durchführung eines Verfahrens nicht wesentlich.

Grundlagen der Handhabung 3

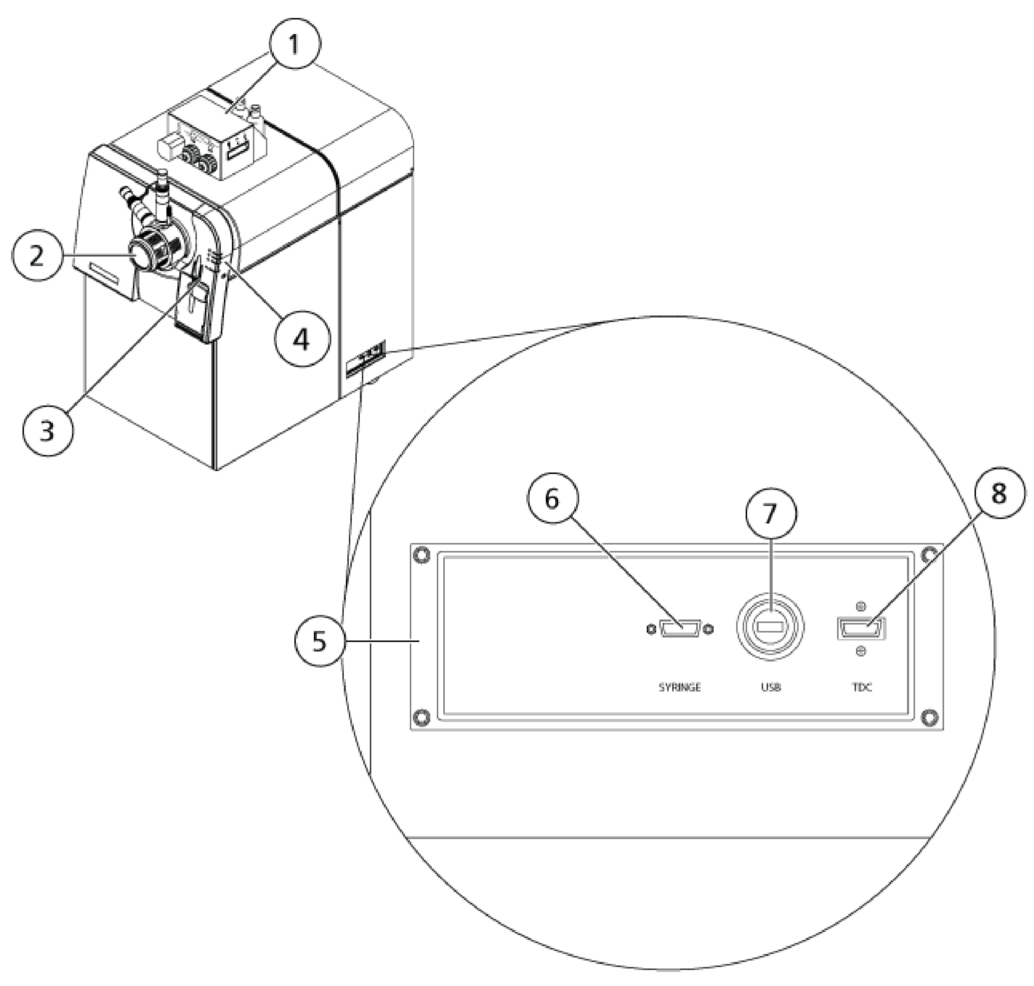
Das AB SCIEX TripleTOF® 5600 System ist für die qualitative und quantitative Analyse einer chemischer und biologischer Proben bestimmt.

Systemüberblick

Das System besteht aus folgenden Komponenten:

- Ein AB SCIEX TripleTOF® 5600 Massenspektrometer mit einer DuoSpray™ Ionenquelle und einer Vakuumpumpe.
- Das optionale Calibrant Delivery System (CDS).
- Ein von AB SCIEX bereitgestellter Windows 7 (32-bit) Computer und Bildschirm mit der Analyst® TF Software zur Geräteoptimierung, Entwicklung von Aufnahmemethoden und Datenaufnahme.

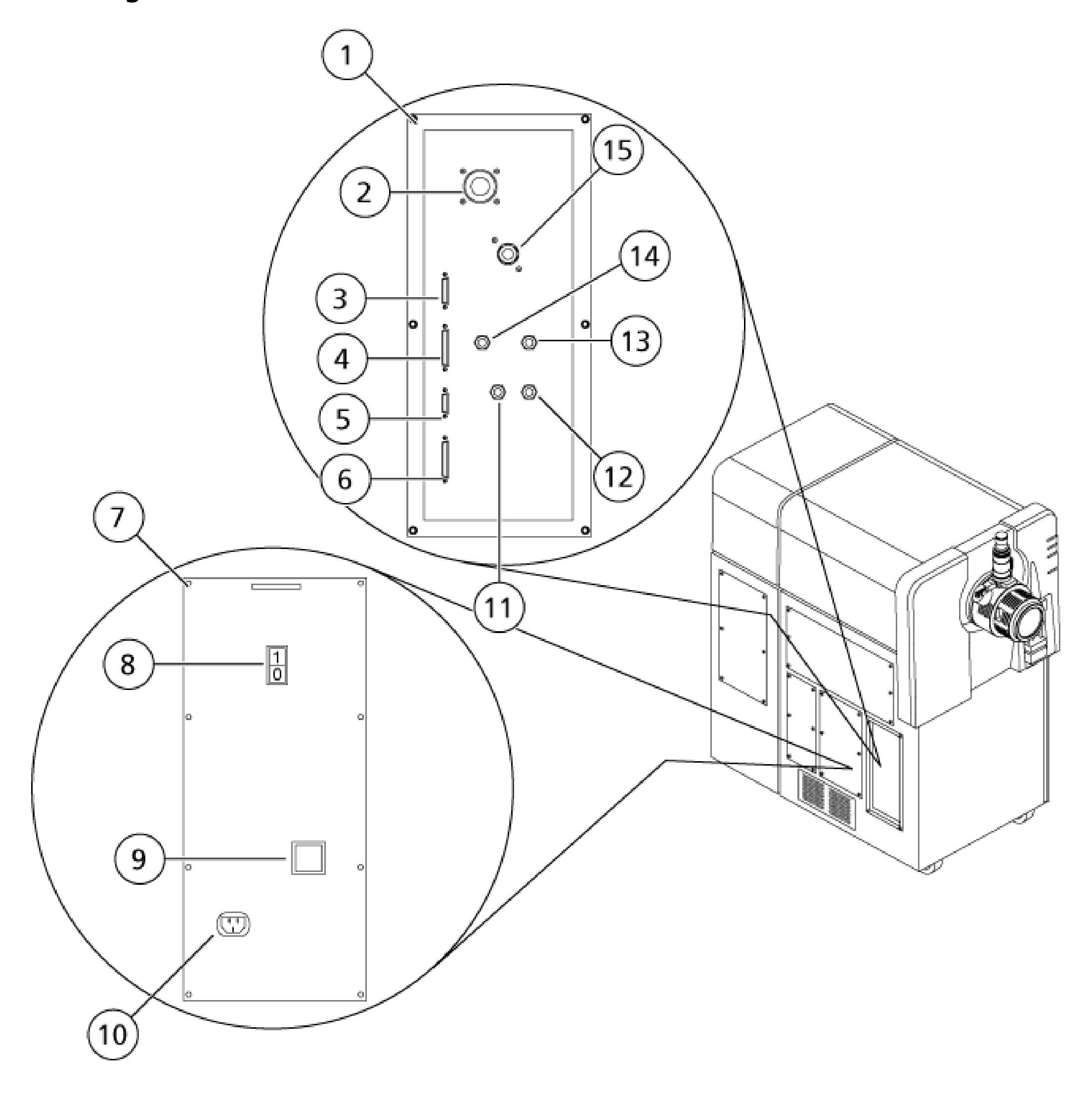
Abbildung 3-1 Vorderansicht und rechte Seitenansicht



Position	Beschreibung	Weitere Informationen...
1	Optionales CDS	Siehe *CDS Operator Guide (CDS-Bedienerhandbuch)*.
2	DuoSpray™ Ionenquelle	Siehe TripleTOF® *Systems Operator Guide (Handbuch)* für die DuoSpray™ Ionenquelle.
3	Spritzenpumpe	Siehe *Justieren der Position der integrierten Spritzenpumpe*.
4	Status-LEDs des Massenspektrometers	Siehe *Status-LED-Symbole*.
5	Kommunikations-Anschlüsse	erhalten Sie von einem AB SCIEX Außendienstmitarbeiter (FSE).
6	Serieller (RS-232) Kabelanschluss für die Spritzenpumpe	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).

Position	Beschreibung	Weitere Informationen...
7	USB-Kabelanschluss für die USB-GPIB-Karte	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
8	InfiniBand-Kabelanschluss für die TDC-Karte	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).

Abbildung 3-2 Linke Seitenansicht



Position	Beschreibung	Weitere Informationen...
1	Gas- und Vakuum-Anschlüsse	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
2	Vakuum-Anschluss der Vorvakuumpumpe	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
3	Anschluss der Kalibrierungssteuerung	Siehe *CDS-Bedienerhandbuch*.
4	AUX E/A-Verbindung Das optionale Startsignal des LC-Systems wird an diesen Port angeschlossen.	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
5	Externer Steuerungsanschluss Dieser Port ist für zukünftige Verwendungszwecke bestimmt.	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
6	Quellen-Anschluss. Einige Ionenquellen werden an diesen Port angeschlossen.	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
7	Wechselstrom-Verteilertafel	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
9	Ein-/Ausschalter des Geräts	Siehe *Inbetriebnahme des Systems*.
9	Abdeckung des Schutzschalters	Siehe *Inbetriebnahme des Systems*. Verwenden Sie den Netzschalter anstelle des Schutzschalters, um das System herunterzufahren.
10	Netzanschluss	Siehe *Inbetriebnahme des Systems*.
11	Curtain Gas™ (Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
12	Gas 1 und Gas 2 (Nullluft- oder Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
13	Quellenabgas- (Nullluft- oder Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
14	CAD-Gas- (Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
15	Quellenabluft-Anschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).

Status-LED-Symbole

Tabelle 3-1 beschreibt die Status-LEDs des Massenspektrometers.

Tabelle 3-1 Status-LED-Symbole

LED	Farbe	Name	Beschreibung
	Grün	Power	Leuchtet, wenn das System eingeschaltet ist.
	Grün	Vacuum	Leuchtet, wenn das richtige Vakuum erreicht wurde. Blinkt, wenn das Zielvakuum noch nicht erreicht ist (während des Anpumpens und Belüftens).
	Grün	Ready	Leuchtet, wenn das System betriebsbereit (Ready) ist. Das System muss sich für den Betrieb im Ready-Status befinden.
	Rot	Fault	Leuchtet, wenn das System einen Systemfehler feststellt.

Nachdem das System eingeschaltet wurde, leuchten alle vier LEDs. Die Power-LED bleibt eingeschaltet. Die anderen drei LEDs blinken zwei Sekunden lang und erlöschen danach. Die Vakuum-LED beginnt zu blinken. Nachdem das richtige Vakuum erreicht worden ist, leuchtet diese LED permanent. Die LED für die Spritzenpumpe blinkt, wenn diese in Betrieb ist.

Theoretische Grundlagen der Handhabung

Die Massenspektrometrie misst das Masse-zu-Ladung-Verhältnis von Ionen, um unbekannte Verbindungen zu identifizieren, bekannte Verbindungen zu quantifizieren und Informationen über die strukturellen und chemischen Eigenschaften von Molekülen zu erhalten.

Das TripleTOF® 5600/5600+-System verfügen über eine Reihe von Quadrupol-Filtern, die Ionen nach ihrem Masse-zu-Ladungswert (m/z-Wert) übertragen. Der erste Quadrupol dieser Reihe ist die QJet® -Ionenführung zwischen der Messblende und dem Q0-Bereich. Die QJet-Ionenführung filtert keine Ionen sondern fokussiert diese, bevor sie in den Q0-Bereich gelangen. Durch Vorfokussierung des Ionenflusses erhöht die QJet-Ionenführung die Geräteempfindlichkeit und verbessert das Signal-Rausch-Verhältnis. Im Q0-Bereich werde die Ionen weiter fokussiert, bevor sie in den Q1-Quadrupol gelangen.

Das Q1-Quadrupol selektiert Ionen, bevor sie in die Q2-Stoßzelle gelangen. In der Q2-Stoßzelle wird die innere Energie der Ionen durch Kollision mit Gasmolekülen bis zu dem Punkt erhöht, an dem die molekularen Bindungen auseinanderbrechen und Produkt-ionen erzeugt werden. Diese Technik ermöglicht es Benutzern, Experimente zu entwerfen, mit denen die Masse-zu-Ladungsverhältnisse von Produkt-ionen gemessen werden, um die Zusammensetzung der Vorläufer-ionen zu bestimmen.

Nach Durchlaufen der Q2-Stoßzelle gelangen die Ionen in die TOF-Region für die weitere Massenanalyse und gelangen dann in den Detektor. Im Detektor erzeugen die Ionen einen Strom, der in einen Spannungsimpuls umgewandelt wird. Diese Spannungsimpulse werden gezählt, und die Anzahl von Impulsen, die den Detektor verlassen, ist direkt proportional zu der Menge der Ionen, die in den Detektor gelangen. Das Instrument überwacht die Spannungsimpulse und wandelt die Informationen in ein Signal um. Das Signal steht für die Ionen-Intensität bei einem bestimmten m/z-Wert und das Gerät zeigt diese Information als Massenspektrum.

Umgang mit Daten

Die Analyst® TF Software benötigt einen Computer mit dem Betriebssystem Windows 7 (32-bit). Der Computer mit der zugehörigen System-Software arbeitet mit dem System-Controller und der zugehörigen Firmware, um das System und die Datenerfassung zu steuern. Beim Betrieb des Systems werden die aufgenommenen Daten an die Software gesendet, wo sie entweder als vollständige Massenspektren, als Intensität einzelner oder mehrerer Ionen als Funktion der Zeit, oder als Gesamtionenstrom als Funktion der Zeit angezeigt werden können.

Betriebsanleitung – Hardware 4

Inbetriebnahme des Systems

Hinweis: Vor der Inbetriebnahme des Systems, lesen Sie bitte die Sicherheitshinweise in den *Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb*.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Stellen Sie sicher, dass das Massenspektrometer in einem Notfall von der Steckdose der Stromversorgung getrennt werden kann. Versperren Sie nicht die Steckdose der Stromversorgung.

Stellen Sie vor dem Einschalten des Systems sicher, dass die Anforderungen vor Ort laut *Site Planning Guide* erfüllt sind. Dieses Handbuch enthält Informationen über Netzversorgung und Anschlüsse, Quellenabgas, Druckluft, Stickstoff, Vakuumpumpe, Lüftung, Abgase und Baufreiheit.

Gehen Sie folgendermaßen vor, wenn Sie das System einschalten wollen:

1. Sicherstellen, dass der 4-l-Auffangbehälter auf der Rückseite des Geräts an den **Ablaufstutzen** und das Laborbelüftungssystem angeschlossen ist.
2. Stellen Sie sicher, dass das Netzkabel am Massenspektrometer angeschlossen ist.
3. Stellen Sie sicher, dass die Netzkabel für das Massenspektrometer und die Vakuumpumpe mit der 200 V bis 240 V Netzstromversorgung verbunden sind.
4. Stellen Sie sicher, dass die folgenden drei Kabel sowohl mit dem Massenspektrometer als auch dem Computer verbunden sind: ein serielles (RS-232) Kabel, ein USB-Kabel und ein InfiniBand-Kabel. Siehe *Abbildung 3-1*.
5. Schalten Sie die Vorvakuumpumpe ein.
6. Entfernen Sie die Abdeckung auf dem Schutzschalter an der – von vorne gesehen – linken Seite des Massenspektrometers und schalten Sie den Schutzschalter dann ein. Siehe *Abbildung 3-1*.
7. Setzen Sie die Abdeckung wieder auf den Schutzschalter und ziehen Sie dann die Schraube, mit der die Abdeckung befestigt wird, handfest an.
8. Schalten Sie das System mit dem Netzschalter des Geräts ein. Siehe *Abbildung 3-1*.
9. Schalten Sie den Computer ein, wenn er ausgeschaltet war.
10. Starten Sie die Software.

Herunterfahren des Systems

1. Beenden oder unterbrechen Sie alle laufenden Scans. Siehe *Probenaufnahme beenden*.

VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Schalten Sie den Probenstrom aus, bevor Sie das System ausschalten.

2. Schalten Sie den Probenfluss zum Massenspektrometer aus und trennen Sie die Probeleitungen vom Peripheriegerät zur Ionenquelle. Lassen Sie Quelle zur ordnungsgemäßen Belüftung angeschlossen.
3. Deaktivieren Sie das Hardwareprofil, falls es aktiv ist, und schließen Sie dann die Software.
4. Schalten Sie das Instrument am Netzschalter links am Instrument aus. Siehe *Abbildung 3-1*.
5. Schalten Sie die Vakuumpumpe aus.
6. Warten Sie 15 bis 20 Minuten, um das System vollständig zu betlüften.
7. Entfernen Sie die Abdeckung auf dem Schutzschalter an der linken Seite des Massenspektrometers und schalten Sie den Schutzschalter dann aus. Siehe *Abbildung 3-1*.
8. Setzen Sie die Abdeckung wieder auf den Schutzschalter und ziehen Sie dann die Schraube, mit der die Abdeckung befestigt wird, handfest an.

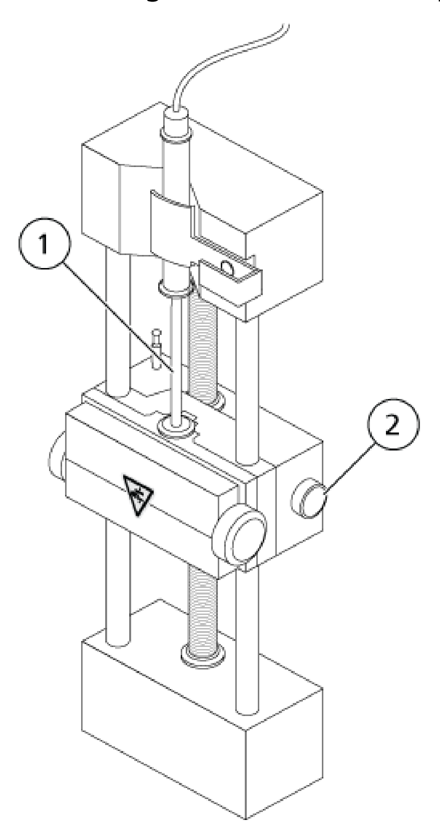
Justieren der Position der integrierten Spritzenpumpe



WARNHINWEIS! Gefahr von Stichverletzungen. Gehen Sie beim Einführen der Spritze vorsichtig vor.

1. Drücken Sie die Taste **Release** auf der rechten Seite der Spritzenpumpe, um die Grundplatte abzusenken, und legen dann die Spritze wie gezeigt ein. Siehe *Abbildung 4-1*.
2. Stellen Sie sicher, dass das Ende der Spritze mit der Grundplatte bündig ist und der Schaft der Spritze in der Aussparung aufsitzt.

Abbildung 4-1 Absenken der Spritze



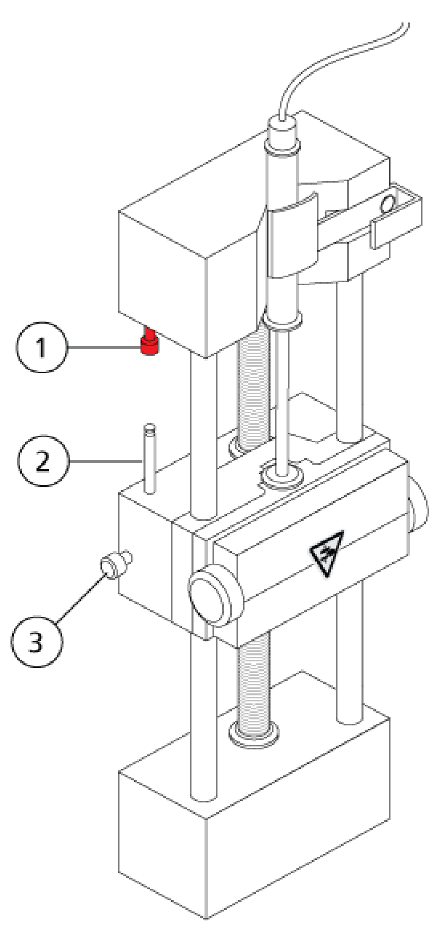
Position	Beschreibung
1	Spritzenkolben
2	Freigabe-Taste. Zum Anheben oder Absenken der Grundplatte drücken.



WARNHINWEIS! Verletzungsgefahr. Vergewissern Sie sich, dass die Spritze korrekt in der Spritzenpumpe sitzt und der automatische Spritzenpumpenanschlag ordnungsgemäß eingestellt ist, um Beschädigung oder Brechen der Glasspritze zu vermeiden.

3. Stellen Sie den Stift so ein, dass der automatische Spritzenanschlag ausgelöst wird, bevor der Spritzenkolben das untere Ende der Glasspritze berührt. Siehe *Abbildung 4-2*.

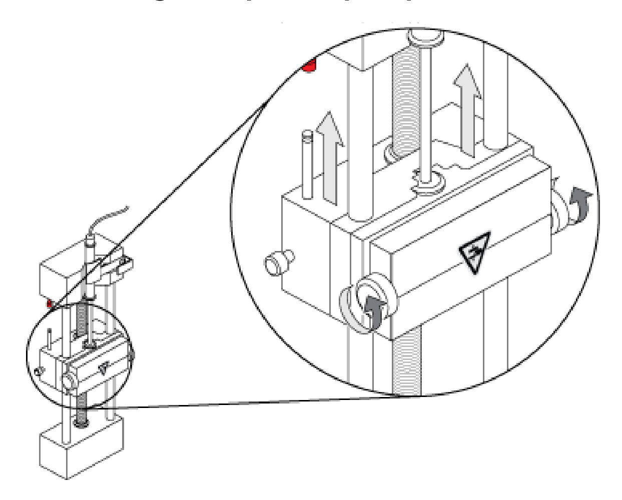
Abbildung 4-2 Automatischer Spritzenanschlag



Position	Beschreibung
1	Automatischer Spritzenanschlag. Nachdem der Stift auf den automatischen Spritzenanschlag trifft, stoppt die Spritzenpumpe.
2	Stift. Stellen Sie die Höhe ein, damit der Spritzenkolben die Spritze während der Probeninfusion nicht berührt.
3	Stift-Feststellschraube. Ziehen Sie die Schraube fest, nachdem die Höhe des Stiftes eingestellt wurde.

4. Drehen Sie die seitlichen Schrauben wie in *Abbildung 4-3* gezeigt an, um die Spritze zu sichern.

Abbildung 4-3 Spritzenpumpen-Schrauben



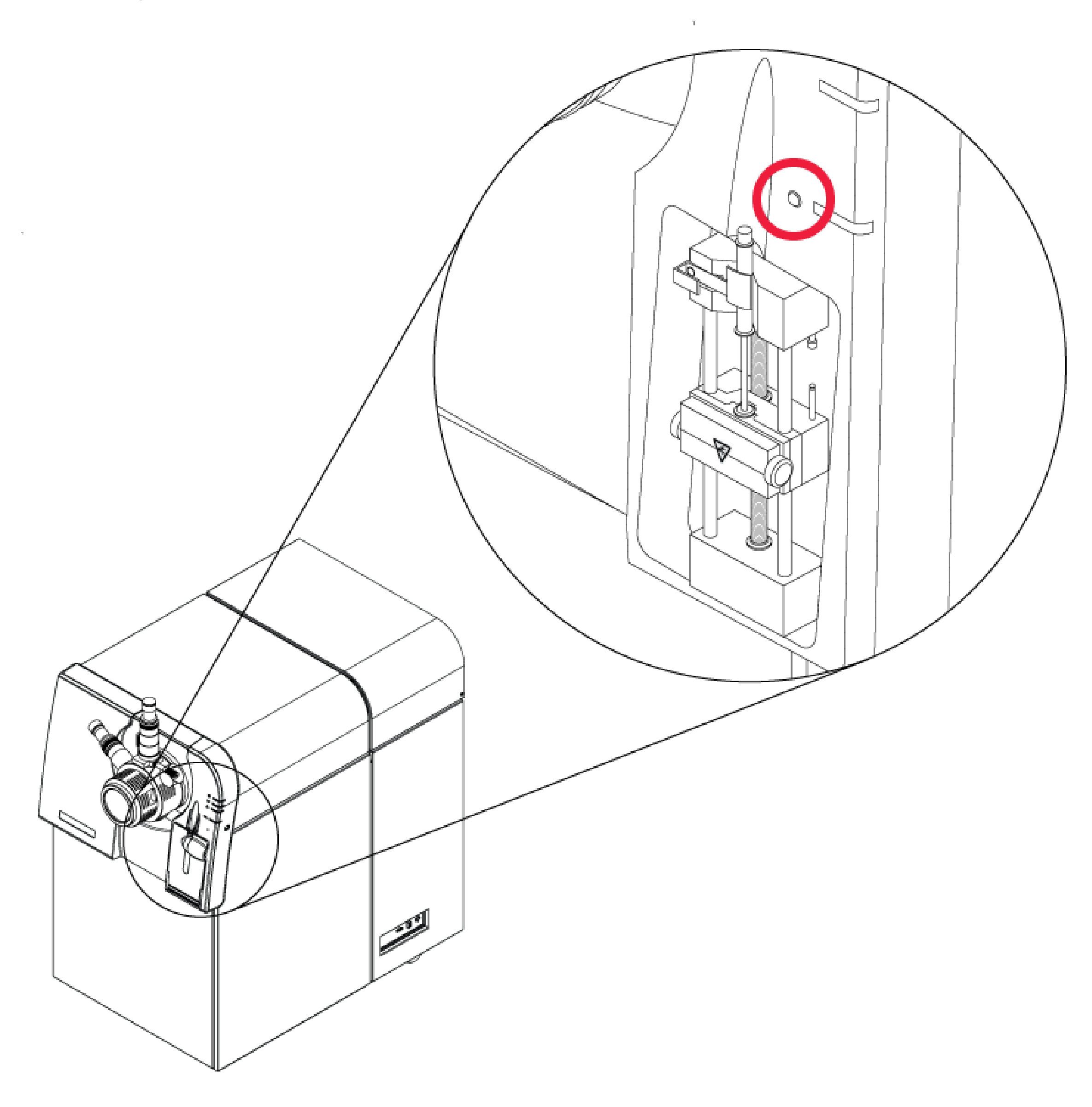
5. In der Navigationsleiste der Analyst® TF Software doppelklicken Sie auf **Manual Tuning**.
6. Klicken Sie auf **Start Syringe**.
7. Klicken Sie auf **Stop Syringe**, um die Spritzenpumpe zu stoppen.

Zurücksetzen der Spritzenpumpe

Wenn die Analyst® TF Software nicht mehr mit der Spritzenpumpe kommuniziert, setzen Sie die Spritzenpumpe zurück.

- Verwenden Sie eine Büroklammer oder ein ähnliches Werkzeug, um die Taste „Reset“ einzudrücken, wie in *Abbildung 4-4* dargestellt.

Abbildung 4-4 Reset-Taste



Betriebsanleitung – Proben-Workflows 5

Tabelle 5-1 Instrumenteneinrichtung

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Erstellen eines Hardware-Profils.	*Erstellen eines Hardware-Profils*	Jedes Hardware-Profil muss ein Massenspektrometer enthalten. Nur Geräte, die im aktiven Hardware-Profil enthalten sind, können zur Erstellung von Erfassungsmethoden verwendet werden.
2	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten.	*Erstellen von Projekten und Teilprojekten*	Bevor Sie ein Experiment beginnen, entscheiden Sie sich, wo die Dateien für den Versuch gespeichert werden sollen. Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
3	Optimieren Sie das Massenspektrometer.	*Optimieren Sie das Massenspektrometer*	Mit diesem Verfahren werden die Parameter der Auflösung und des Massenspektrometers optimiert und das Massenspektrometer kalibriert, um die beste Empfindlichkeit und Leistung vom System zu erhalten.

Tabelle 5-2 Probenaufnahme-Workflow

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten.	*Erstellen von Projekten und Teilprojekten*	Bevor Sie ein Experiment beginnen, entscheiden Sie sich, wo die Dateien für den Versuch gespeichert werden sollen. Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
2	Eine Erfassungsmethode erstellen.	*Bedienungsanweisungen – Erfassungsmethoden*	Erstellen Sie eine Erfassungsmethode für das Massenspektrometer und jegliche LC-Geräte, um Proben zu analysieren. Eine Erfassungsmethode zeigt an, welche Peripheriegeräte zur Datenerfassung zu verwenden sind, sowie die damit verbundenen Parameter.
3	Erstellen und Übergabe eines Batch	*Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen* und *Eine Probe oder einen Probensatz übergeben*	Nach dem Erstellen einer Erfassungsmethode verarbeiten Sie Proben durch Erstellen eines Erfassungs-Batch und Übergabe des Batch an die Erfassungs-Warteschleife.

Tabelle 5-2 Probenaufnahme-Workflow (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in …	Was tut es?
4	Erfassen von Daten.	*Daten erfassen*	Die Verarbeitung von Proben umfasst die Verwaltung der Akquisitions-Warteschleife und Überwachung des Instrumenten- und Gerätestatus. Verwenden Sie den Warteschleifen-Manager, um Proben zu übergeben und Daten zu erfassen. Der Warteschleifen-Manager zeigt den Status von Warteschleife, Batch und Probe an und ermöglicht die Verwaltung von Proben und Batches in der Warteschleife.
5	Analyse von Daten im Explore-Modus. – ODER –	*Bedienungsanleitung – Analyse und Verarbeitung von Daten*	Im Explore-Modus sind viele Tools zum Ansehen und Verarbeiten der erfassten Daten verfügbar. Diagramme können mit Kennzeichnungen und Beschriftungen von Peaks angepasst werden, Konturdiagramme können angezeigt und Spektren können in der Bibliothek gespeichert werden.
6	Analysieren von Daten und Drucken von Berichten mit weitergehender Software.	MultiQuant™ Software/PeakView® Software	Verwenden Sie die MultiQuant oder PeakView Software, um Daten zu analysieren. Weitere Informationen finden Sie in der Dokumentation, die der jeweiligen Software beiliegt.

Tabelle 5-3 Workflows für erfahrene Benutzer

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in …
1	Massenkalibrierung des Geräts	Das Tutorial zur Massenkalibrierung finden Sie unter **Start > Programme > AB SCIEX > Analyst® TF > Software Guides.**
2	Optimieren des Massenspektrometer.	Das Tutorial zur manuellen Optimierung finden Sie unter **Start > Programme > AB SCIEX > Analyst® TF > Software Guides.**

Betriebsanleitung – Hardware-Profile und Projekte 6

Hardware-Profile

Ein Hardware-Profil teilt der Software mit, wie das Massenspektrometer und die Geräte konfiguriert und an den Computer angeschlossen sind.

Jedes Hardware-Profil muss ein Massenspektrometer enthalten. Stellen Sie vor dem Erstellen einer Erfassungsmethode sicher, dass alle Geräte, die in der Methode verwendet werden, im Hardware-Profil enthalten sind. Wenn Sie während der Datenerfassung die Spritzenpumpe verwenden wollen, stellen Sie bitte sicher, dass diese in den Konfigurationsoptionen des Massenspektrometers aktiviert ist.

Die im aktiven Hardware-Profil konfigurierten und im Dialogfeld **Add/Remove Device Method** ausgewählten Geräte erscheinen im Teilfenster **Acquisition Method** als Symbole. Nur Geräte, die im aktiven Hardware-Profil enthalten sind, können zur Erstellung von Aufnahmemethoden verwendet werden.

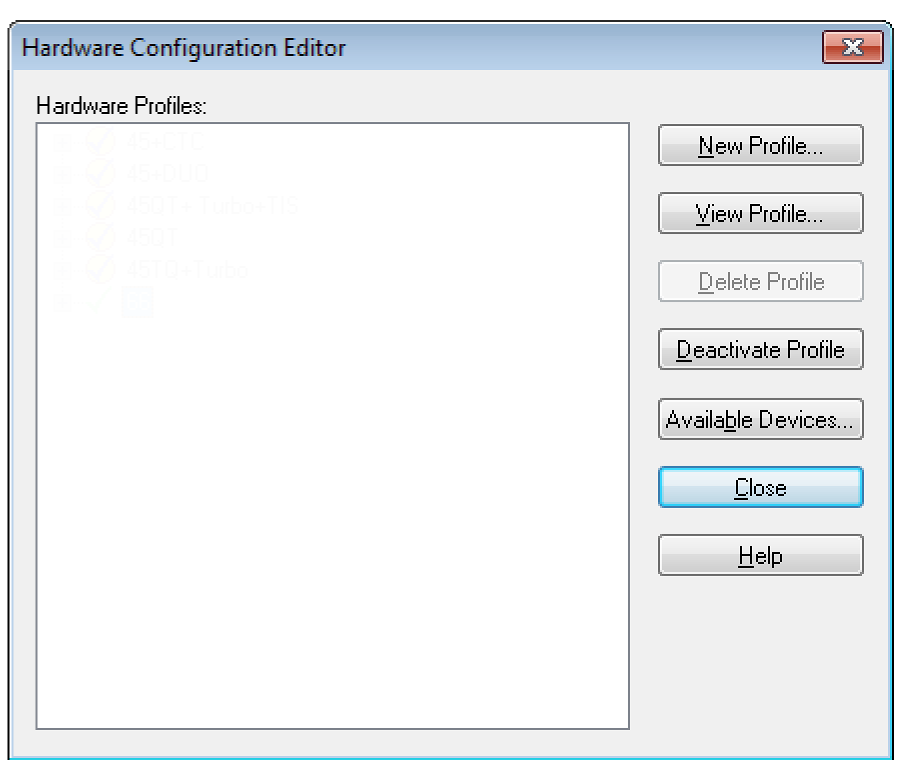
Weitere Informationen über das Einrichten der physischen Verbindungen mit den Geräten finden Sie im *Handbuch für das Einrichten von Peripheriegeräten*. Eine Liste der unterstützten Geräte finden Sie im *Software Installation Guide* der Analyst® TF Software.

Erstellen eines Hardware-Profils

Der Benutzer kann mehrere Hardware-Profile erstellen, aber nur ein Profil kann zu einer gegebenen Zeit aktiv sein.

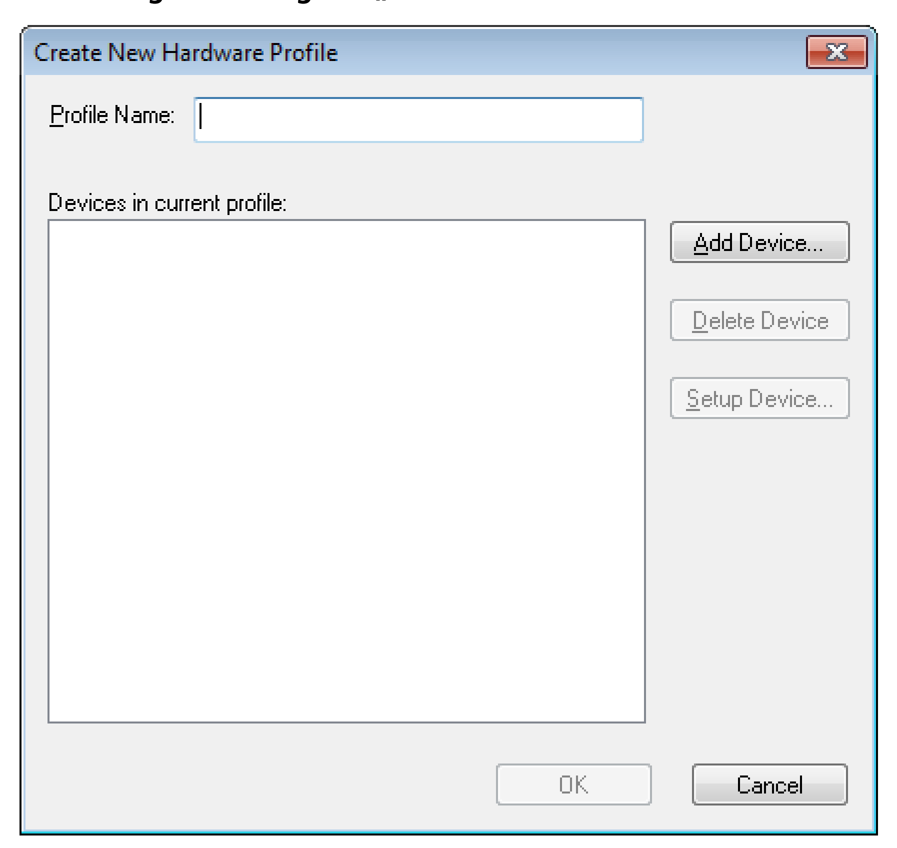
1. In der Navigationsleiste unter **Configure** doppelklicken Sie auf **Hardware Configuration**.

Abbildung 6-1 Dialogfeld „Hardware Configuration Editor“



2. Kicken Sie auf **New Profile**.

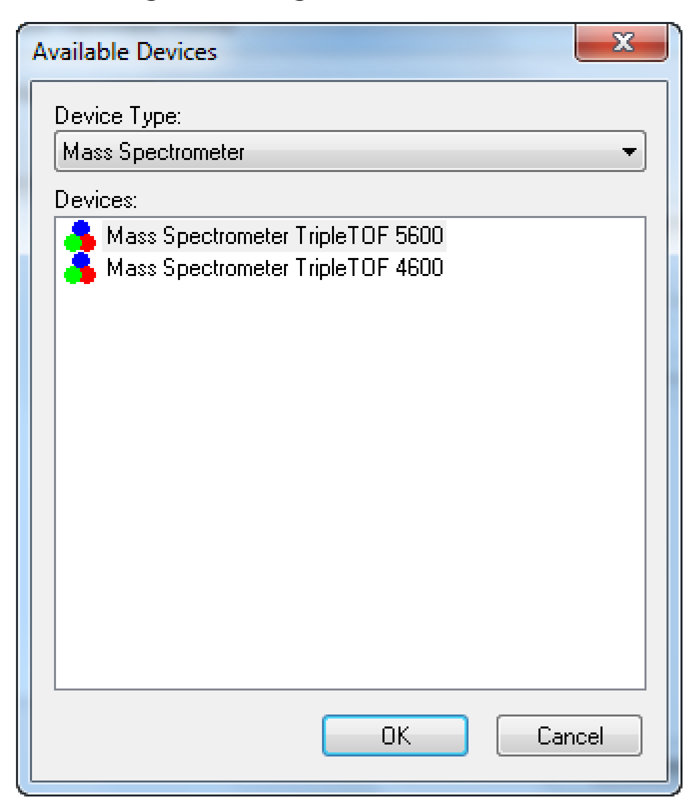
Abbildung 6-2 Dialogfeld „Create New Hardware Profile“



3. Geben Sie einen Namen in das Feld **Profile Name** ein.
4. Klicken Sie auf **Add Device**.

   Im Dialogfeld **Available Devices** ist der voreingestellte Wert im Feld **Device Type Mass Spectrometer**.
5. Wählen Sie das Massenspektrometer aus der **Devices**-Liste.
6. Klicken Sie auf **OK**.
7. Wählen Sie das Massenspektrometer aus der Liste **Devices in current profile** aus.

Abbildung 6-3 Dialogfeld „Available Devices“

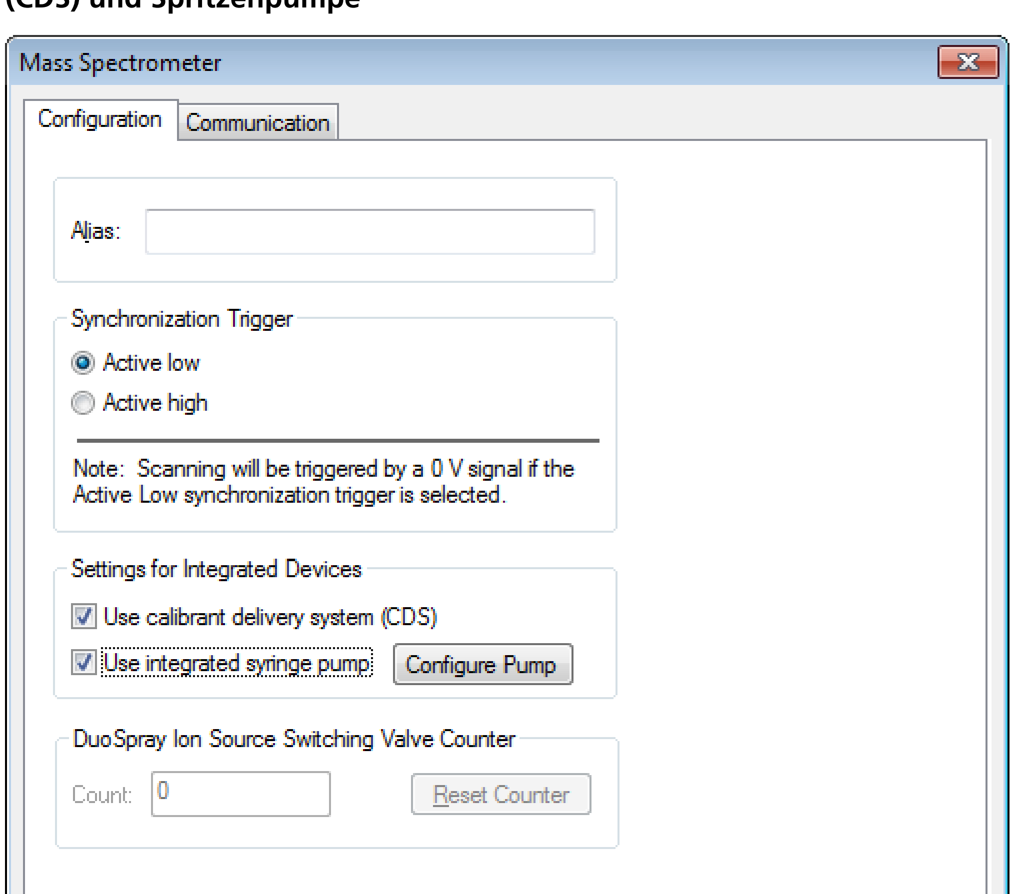


8. Klicken Sie auf **Setup Device**.
9. (Optional) Um das Massenspektrometer für die Benutzung unter Verwendung der integrierte Spritzenpumpe zu konfigurieren, wählen Sie in der Registerkarte **Configuration** das Kontrollkästchen **Use integrated syringe pump**.



WARNHINWEIS! Verletzungsgefahr. Vergewissern Sie sich, dass die Spritze korrekt in der Spritzenpumpe sitzt und der automatische Spritzenpumpenanschlag ordnungsgemäß eingestellt ist, um Beschädigung oder Brechen der Glasspritze zu vermeiden.

Abbildung 6-4 Registerkarte „Configuration" mit konfiguriertem Kalibrier-System (CDS) und Spritzenpumpe



10. Wählen Sie zusätzliche Funktionen auf der Registerkarte **Configuration** und **Communication** je nach Bedarf aus.
11. Klicken Sie auf **OK** um zum Dialogfeld **Create New Hardware Profile** zurückzukehren.
12. Fügen Sie jedes weitere Gerät hinzu, das mit dem Massenspektrometer verwendet wird.
13. Klicken Sie im Dialogfeld **Create New Hardware Profile** auf **OK**.
14. Klicken Sie auf das Hardware-Profil im **Hardware Configuration Editor**.
15. Klicken Sie auf **Activate Profile**.

    Das Häkchen wird grün. Wird ein rotes X angezeigt, dann gibt es ein Problem mit der Hardware-Profil-Aktivierung.

Tipp! Ein Hardware-Profil muss vor der Aktivierung eines anderen Profils nicht deaktiviert werden. Klicken Sie auf ein Hardware-Profil und klicken Sie dann auf **Activate Profile**. Das andere Profil wird automatisch deaktiviert.

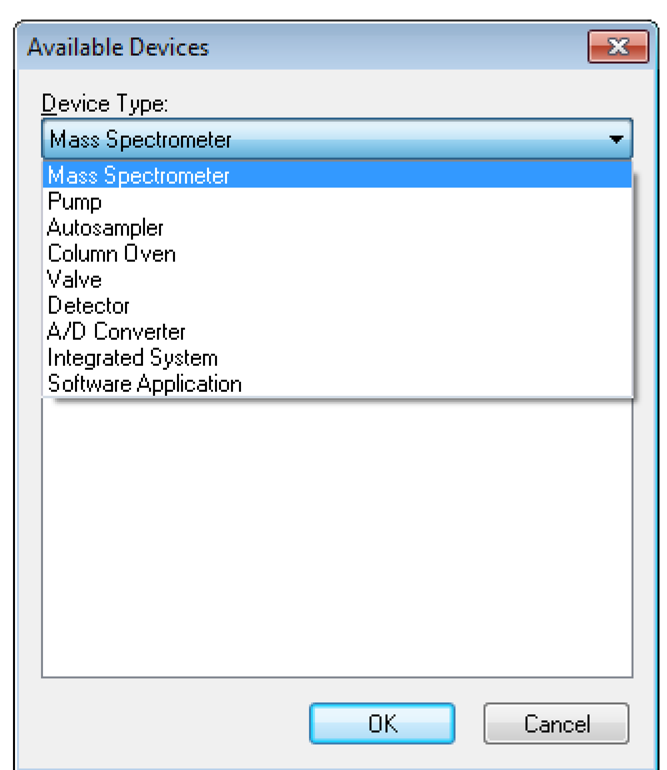
16. Klicken Sie auf **Close**.

Geräte einem Hardware-Profil hinzufügen

Geräte müssen so konfiguriert werden, dass die Software mit ihnen kommunizieren kann. Wenn die Software installiert ist, wird auch der erforderliche Treiber für jedes Gerät installiert. Konfigurieren Sie das Gerät, nachdem die Geräte physisch mit dem Computer verbunden sind.

1. Öffnen Sie den **Hardware Configuration Editor**.
2. In der Liste **Hardware Profile** deaktivieren Sie das Hardware-Profil. Bitte beachten Sie, dass Hardware-Profile nur in deaktivierter Form bearbeitet werden können.
3. Klicken Sie auf **Edit Profile**.
4. Klicken Sie auf **Add Device**.
5. Im Dialogfeld **Available Devices** wählen Sie das Gerät aus der Liste **Device Type**.

Abbildung 6-5 Dialogfeld „Available Devices"



6. Klicken Sie auf **OK**.
7. Wählen Sie das Gerät aus der Liste **Devices in current profile** aus.

8. Klicken Sie auf **Setup Device**.

   Ein Dialogfeld mit Konfigurationswerten für das Gerät wird geöffnet.

9. (Optional) Geben Sie einen Namen oder eine Kennung in der Registerkarte **Communication** im Feld **Alias** ein.

   Hinweis: Für Geräte mit serieller Kommunikation stellen Sie sicher, dass die ausgewählte serielle Schnittstelle mit dem seriellen Port übereinstimmt, an dem das Gerät physisch angeschlossen ist.

   Hinweis: Das Feld **Alias** kann auch als Feld **Name** bezeichnet werden und kann auf einer anderen Registerkarte unter **Alias** zu finden sein.

   - Wenn das Gerät einen **seriellen Anschluß** als Kommunikationsschnittstelle verwendet, wählen Sie den COM-Port, an den das Gerät angeschlossen ist, in der Liste **COM Port Number** aus.
   - Verwendet das Gerät **Ethernet** als Kommunikationsschnittstelle, geben Sie die durch den Administrator zugewiesene **IP Address** des Gerätes ein oder verwenden den entsprechenden **Host Name** als Adresse.
   - Verwendet das Gerät eine **GPIB Board (GPIB-Karte)** als Kommunikationsschnittstelle, dann ändern Sie die Einstellungen für die GPIB-Karte nicht.

   Die übrigen für das Gerät voreingestellten Werte sind wahrscheinlich passend. Ändern Sie sie nicht. Für Informationen über die Registerkarten **Configuration** und **Communication** siehe Help.

10. Um die voreingestellten Werte für das Gerät wiederherzustellen, klicken Sie in der Registerkarte **Kommunikation** auf **Set Defaults**.
11. Um die Konfiguration zu speichern, klicken Sie auf **OK**.
12. Wiederholen Sie die Schritte *4* bis *11* für jedes Gerät.
13. Klicken Sie im Dialogfeld **Create New Hardware Profile** auf **OK**.
14. Zum aktivieren des Hardware-Profils klicken Sie im Dialogfeld **Hardware Configuration Editor** auf das Hardware-Profil.
15. Klicken Sie auf **Activate Profile**.

    Das Häkchen wird grün. Wird ein rotes X angezeigt, dann gibt es ein Problem mit der Hardware-Profil-Aktivierung. Weitere Informationen erhalten Sie unter *Fehlerbehebung bei der Hardware-Profil-Aktivierung auf Seite 42*.

    Tipp! Ein aktives Hardware-Profil muss vor der Aktivierung eines anderen Profils nicht deaktiviert werden. Klicken Sie auf ein inaktives Hardware-Profil und klicken Sie dann auf **Activate Profile**. Das andere Profil wird automatisch deaktiviert.

16. Klicken Sie auf **Close**.

Fehlerbehebung bei der Hardware-Profil-Aktivierung

Wenn ein Hardware-Profil nicht aktiviert werden kann, öffnet sich ein Dialogfeld und zeigt an, bei welchem Geräte im Profil ein Fehler aufgetreten ist. Ein Fehler in einem Profil kann auf Kommunikationsfehlern beruhen.

1. Lesen Sie die generierte Fehlermeldung. Abhängig von der Nachricht liegt möglicherweise ein Problem mit einem Gerät vor oder damit, wie die Kommunikation eingestellt ist.
2. Stellen Sie sicher, dass das Gerät mit Strom versorgt wird und eingeschaltet ist.
3. Überprüfen Sie, ob der dem Gerät zugeordnete COM-Port korrekt ist.
4. Stellen Sie sicher, dass die Kommunikations-Einstellungen am Gerät (z. B. DIP-Schalter-Einstellungen) korrekt eingestellt sind und mit den Einstellungen in der Registerkarte **Communication** übereinstimmen.
5. Schalten Sie das Gerät aus.
6. Warten Sie 10 Sekunden.
7. Schalten Sie das Gerät ein.

   Warten Sie, bis alle beim Einschalten des Gerätes stattfindenden Prozesse abgeschlossen sind, bevor Sie versuchen, das Hardware-Profil wieder zu aktivieren. Manche Geräte benötigen 30 Sekunden oder mehr, um alle beim Einschalten des Gerätes ablaufenden Prozesse auszuführen.
8. Hardwareprofil aktivieren.
9. Wenn das Problem weiterhin besteht, löschen Sie das fehlerhafte Profil und erstellen Sie danach ein neues.
10. Wenn das Problem weiterhin besteht, wenden Sie sich an den technischen Support.

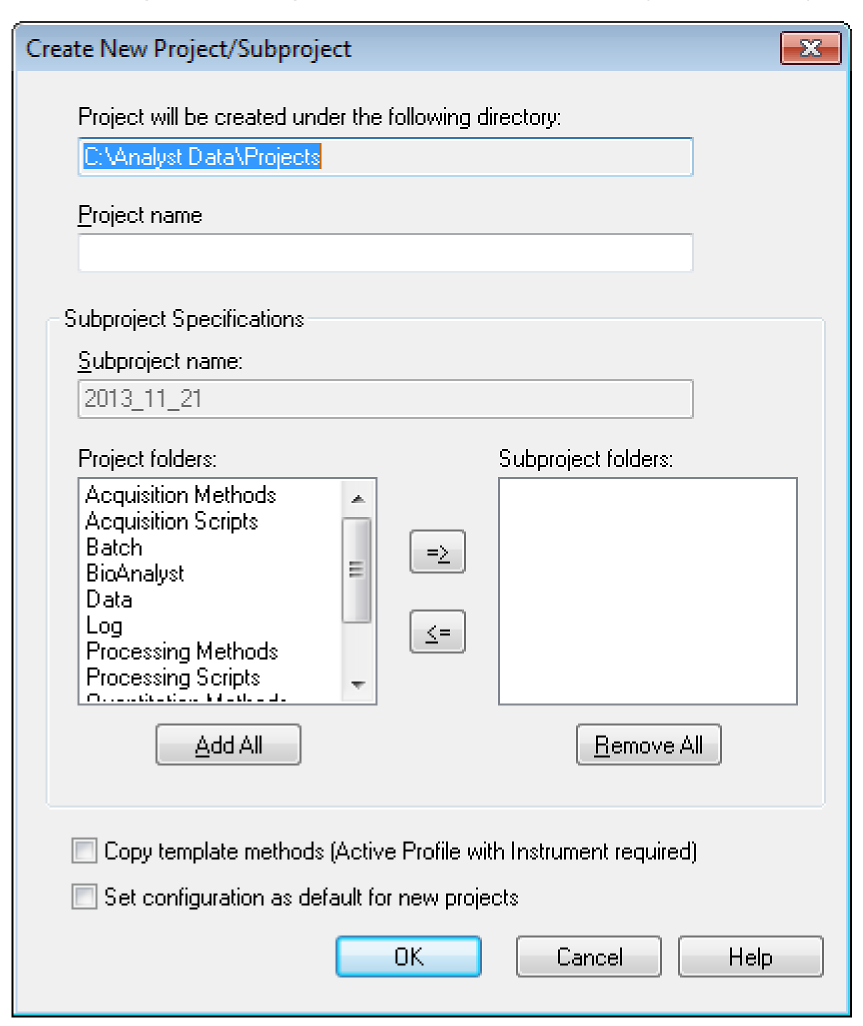
Projekte und Teilprojekte

Erstellen von Projekten und Teilprojekten

Um eine Teilprojekt-Struktur in einem Projekt zu verwenden, erstellen Sie die Teilprojekt-Struktur, wenn das Projekt erstellt wird.

1. Klicken Sie auf **Tools > Project > Create Project.**

Abbildung 6-6 Dialogfeldfeld „Create new Project/Subproject"



2. Geben Sie im Feld **Project name** einen Projektnamen ein.
3. (Optional) Um Teilprojekte zu verwenden, wählen Sie den gewünschten Ordner und verschieben ihn mit den Pfeiltasten zur Liste **Subproject folders**.
4. (Falls Teilprojekte verwendet werden) Geben Sie im Feld **Subproject name** einen Namen für das erste Teilprojekt ein oder verwenden Sie vorhandene Daten.
5. (Optional) Um diese Projekt- und Teilprojekt-Ordner-Organisation für alle neuen Projekte zu verwenden, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Set configuration as default for new projects**.

   Alle neuen Projekte werden mit dieser Ordner-Konfiguration erstellt.
6. Klicken Sie auf **OK**.

Teilprojekt erstellen

Teilprojekte können nur in einem Projekt erstellt werden, das eine bestehende Teilprojekt-Struktur besitzt.

1. Wählen Sie das Projekt aus der Symbolleiste **Project** in der Liste **Project** aus.
2. Klicken Sie auf **Tools > Project Create Subproject.**
3. Geben Sie im Feld **Subproject name** einen Namen für das Teilprojekt ein oder verwenden Sie die existierenden Daten.
4. Klicken Sie auf **OK**.

Teilprojekte kopieren

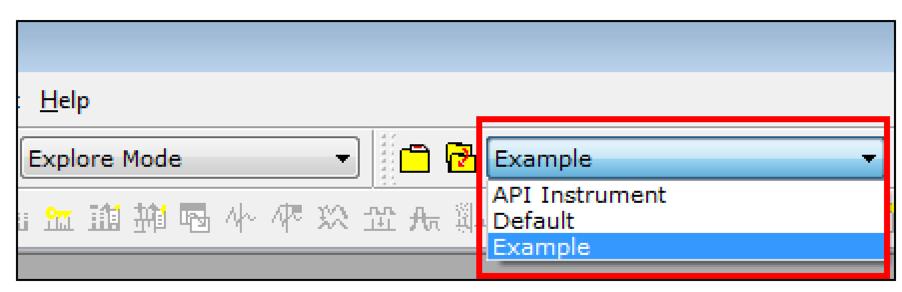
Ein Teilprojekt kann aus einem anderen Projekt kopiert werden, das bestehende Teilprojekte besitzt. Wenn die kopierten Teilprojekte Ordner besitzen, die ebenfalls im Projekt-Ordner enthalten sind, verwendet die Software die Ordner auf Projektebene.

1. Klicken Sie auf **Tools > Project** Copy Subproject.
2. Klicken Sie im Dialogfeld **Copy Subproject** auf **Browse**, um zum Ausgangs-Teilprojekt zu navigieren.
3. Klicken Sie auf **OK**.
4. Wählen Sie das Teilprojekt in der Liste **Source Subproject** aus.
5. Klicken Sie auf **Browse** um zum gewünschten Ziel zu navigieren
6. Geben Sie den Namen im Feld **Target Subproject** ein.
7. Klicken Sie auf **OK**.
8. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
    - Um alle Ordner und Dateien aus der **Subproject Source** in die **Subproject Destination** zu kopieren, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Copy Contents**.
    - Um nur die Ordner in der gleichen Struktur in die **Subproject Destination** zu kopieren, stellen Sie sicher, dass das Kontrollkästchen **Copy Contents** vor dem Kopieren deaktiviert ist.
9. Klicken Sie auf **Copy**.

Wechseln zwischen Projekten und Teilprojekten

- Klicken Sie in der Software-Funktionsleiste in der Projekt-Liste auf das gewünschte Projekt oder Teilprojekt.

Abbildung 6-7 Projektliste



Die Projektliste in dieser Abbildung zeigt die Ordner **API Instrument**, **Default** und **Example** an.

Vorinstallierte Projekt-Ordner

Drei Projekt-Ordner werden mit der Software installiert: **API Instrument**, **Default** und **Example**.

Ordner „API Instrument"

Der Ordner **API Instrument** ist eindeutig und für die korrekte Funktion des Massenspektrometers sehr wichtig. Das **API Instrument**-Projekt enthält Informationen, die für das Tuning und die Kalibrierung des Massenspektrometers erforderlich sind. Zu diesen Informationen gehören Parametereinstellungsdateien, Referenzdateien, Instrumenten-Dateien mit Informationen über Kalibrierung und Auflösung und die beim automatischem Tuning (automatischen Optimieren) verwendeten Aufnahmemethoden. Der **API Instrument**-Ordner enthält auch Dateien über manuelle Tuningläufe, die über den Button **Start** anstatt dem Button **Acquire** durchgeführt wurden. Diese Dateien werden automatisch in den **API Instrument**-Ordner im **Tuning Cache**-Ordner gespeichert und mit dem Erstellungsdatum und der Erstellungszeit benannt. Der **Tuning Cache** wird automatisch in regelmäßigen Abständen gelöscht.

Default Ordner

Der **Default**-Ordner enthält Ordner, die in neuen Projekten enthalten sind und dient als Vorlage für neue Projekte.

Example Ordner

Der **Example**-Ordner enthält beispielhafte Methoden und Dateien. Benutzer können mit den Beispiel-Dateien die Arbeit im **Explore**-Modus -Modus üben

Sichern des Ordner „API Instrument"

Sichern Sie den Ordner **API Instrument** regelmäßig und nachdem die routinemäßigen Wartungsarbeiten durchgeführt worden sind.

- Kopieren Sie den **API Instrument**-Ordner, fügen ihn an einer anderen Stelle, vorzugsweise in einem anderen Computer ein und benennen den Ordner um. Verwenden Sie, wenn Sie den Ordner umbenennen, das Datum und eine Massenspektrometer-Referenz, wenn Sie mehr als ein Massenspektrometer haben. Um das Verzeichnis wieder herzustellen, benennen Sie das aktuelle **API Instrument**-Verzeichnis um,

kopieren die Sicherungskopie ins **Projects**-Verzeichnis und ändern den Namen der Sicherungskopie in **API Instrument**.

Den Ordner „API Instrument“ wiederherstellen

Sichern Sie den Ordner **API Instrument** regelmäßig und nachdem die routinemäßigen Wartungsarbeiten durchgeführt worden sind.

1. Benennen Sie den aktuellen Ordner **API Instrument** um.
2. Kopieren Sie den Sicherungsordner in den Ordner **Projects**.
3. Ändern Sie den Namen des Sicherungsordners in **API Instrument**.

Betriebsanleitung – Tunen und Kalibrieren

7

Erforderliche Materialien
• Tuning-Lösungen, die im Standard-Chemie-Testsatz mit dem System geliefert werden. Bei Bedarf kann ein neues Kit bei AB SCIEX bestellt werden. • gasdichte Spritze (1,0 ml empfohlen) • roter PEEK-Probenschlauch (0.005" / 127 µm Innendurchmesser).

Voraussetzungen
• Das Spray ist stabil und die richtige Tuning-Lösung wird verwendet.

Optimieren Sie das Massenspektrometer

Im Folgenden wird beschrieben, wie die Leistung des Massenspektrometers überprüft wird. Weitere Informationen über die Verwendung der Instrument-Performance-Optionen finden Sie unter Hilfe.

1. In der Navigationsleiste unter **Tune und Calibrate**, doppelklicken Sie auf **Manual Tuning**.
2. Führen Sie einen TOF MS- oder Produkt-Ionen-Scan-Typ durch und bestätigen Sie, dass es ein stabiles TIC gibt und dass die Peaks von Interesse im Spektrum vorhanden sind.
3. In der Navigationsleiste unter **Tune und Calibrate** doppelklicken Sie auf **Instrument Optimization**.

   Das Dialogfeld Instrument Optimization wird angezeigt.
4. Wählen Sie eine Tuning-Lösung. Vergewissern Sie sich, dass die Tuning-Lösung der Referenztabelle entspricht.
5. Das Kontrollkästchen **Verify Performance Only** ist vorausgewählt. Klicken Sie auf **Next**.

   Lassen Sie für dieses Beispiel diese Option ausgewählt. Wenn der Bericht anzeigt, dass ein Tuning für das Instrument erforderlich ist, führen Sie die Geräteoptimierung erneut aus und wählen Sie einen Scan-Modus oder mehrere Scan-Modi zur Optimierung.
6. Vergewissern Sie sich, dass die Ionenquelle und Spritzenparameter geeignet sind.

   Hinweis: Benutzer können auch das CDS zum Injizieren der Lösung verwenden. Vergewissern Sie sich, dass die Tuning-Lösung der Konfiguration in der Referenztabelle entspricht. Stellen Sie die geeignete Flussrate ein und klicken Sie dann auf CDS Inject.

   Hinweis: Vergewissern Sie sich, dass die korrekte Kalibriermittelventilposition im Referenztabelleneditor für die gewählte Referenztabelle ausgewählt ist. CDS kann aus bis zu vier Positionen, A bis D, auswählen.

7. Klicken Sie auf **GO**.

   Das Fenster **Verifying or Adjusting Performance** wird geöffnet. Nachdem der Vorgang abgeschlossen ist, öffnet sich die **Results Summary**. Weitere Informationen erhalten Sie unter Hilfe.

Über das Dialogfeld „Verifying or Adjusting Performance“

Die obere linke Ecke zeigt den Teil des Gerätes, der optimiert wird.

Das Diagramm **Current Spectrum** zeigt das Spektrum des aktuellen Scans, den optimalen von der Software ausgewählten Scan oder den Scan mit dem aktuellen Parameterwert, wenn die Softwareergebnisse im interaktiven Modus betrachtet werden.

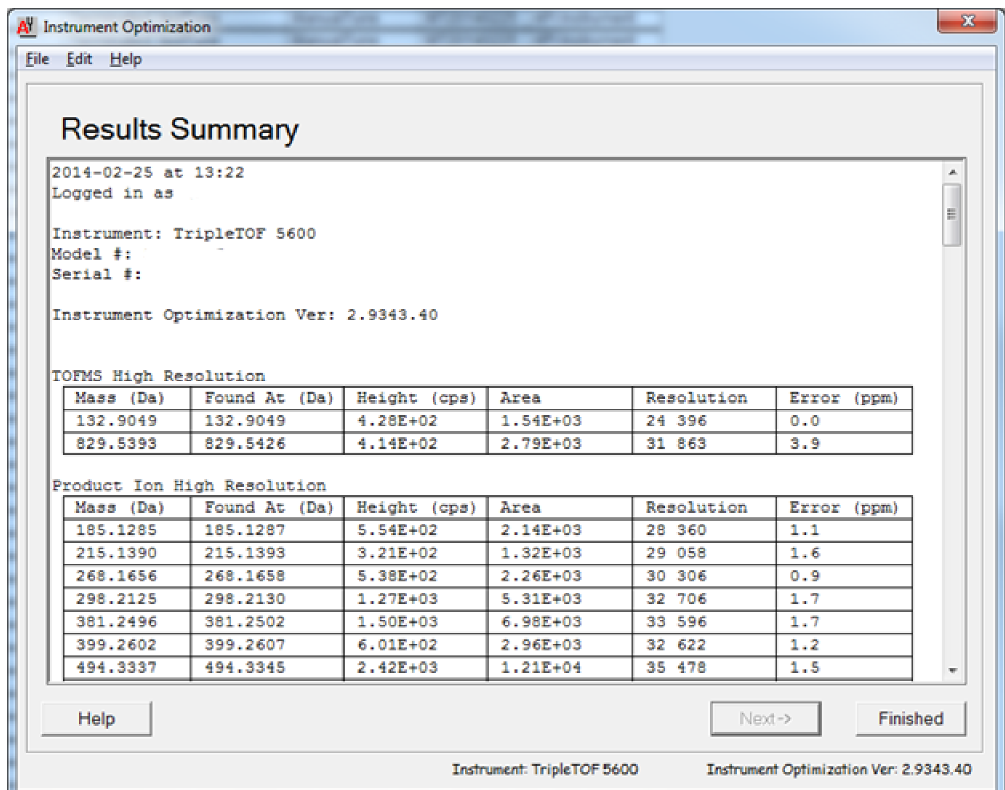
Die **Instrument Optimization Decision Plots** im rechten oberen Diagramm zeigen die Intensitätskurven im Vergleich zu den Spannungskurven der Parameter dynamisch an, die derzeit optimiert werden.

Zusammenfassung der Ergebnisse

Die **Zusammenfassung der Ergebnisse** ist eine Aufzeichnung aller Änderungen der Geräteeinstellungen, die vom **Instrument Optimization**-Assistenten vorgenommen wurden.



Abbildung 7-1 Zusammenfassung der Ergebnisse



Die **Results Summary** wird als Dokument im Ordner **\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization** abgelegt. Benutzer können die **Results Summary** ausdrucken oder zuvor gespeicherte **Results Summary** öffnen.

Bedienungsanweisungen – Erfassungsmethoden 8

Verwenden Sie die SWATH™ Erfassungsfunktion, die sowohl im **Method Wizard** als auch im **Acquisition Method Editor** verfügbar ist, um SWATH -Erfassungsmethoden zu erstellen. SWATH Methoden mit variabler Fensterbreite können ebenfalls mit dem **Method Wizard** oder dem **Acquisition Method Editor** erstellt werden. Weitere Informationen finden Sie im *Advanced User Guide*, in der Analyst® TF Hilfe und der **Method Wizard** Hilfe.

Es wird empfohlen, dass nur diejenigen Benutzer Erfassungs- und Quantifizierungsmethoden erstellen oder ändern, die mit der Methodenentwicklung vertraut sind. Weitere Informationen über Rollen und Sicherheit finden Sie im Abschnitt „About People and Roles" im *Laboratory Director's Guide*.

Erstellen Sie eine Erfassungsmethode mit dem „Method Wizard"

Die Erfassungsmethode kann in einem vorhandenen Projekt gespeichert werden.

Tipp! Zum Kopieren der Vorlagenmodelle des **Method Wizard** in den Ordner **Acquisition Methods** im Projektordner aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Copy method templates** im Dialogfeld **Create New Project or Subproject**. Um diesen Dialogfeld zu öffnen, klicken Sie auf **Tools > Project > Create Project or Create Subproject.**

1. Stellen Sie sicher, dass ein Hardware-Profil mit dem Massenspektrometer und einem Peripheriegerät aktiv ist.
2. Auf der Software-Symbolleiste stellen Sie sicher, dass das entsprechende Projekt ausgewählt ist.
3. In der Navigationsleiste unter dem Modus **Acquire** doppelklicken Sie auf den **Method Wizard**.

   Daraufhin öffnet sich der **Method Wizard**.

   Tipp! Bewegen Sie den Cursor über dem Fenster, um Werkzeugtipps und Verfahren anzuzeigen.
4. Wählen Sie **TOF MS (+)** in der Liste **Choose MS Method**.
5. Wählen Sie die LC-Methode, die für das Hardware-Profil erstellt wurde, aus der Liste **Choose LC Method**.
6. Geben Sie einen Namen für die Methode ein und drücken Sie auf **Enter**.
7. Klicken Sie auf **Next**.
8. Überprüfen Sie die Werte in der Registerkarte **Ion Source Parameters**, bearbeiten Sie diese, falls erforderlich, und klicken Sie dann auf **Next**.
9. Überprüfen Sie die Werte in der Registerkarte **TOF MS**, bearbeiten Sie diese, falls erforderlich, und klicken Sie dann auf **Finish**.

Tipp! Falls erforderlich, können die Benutzer die Erfassungsmethode mit dem **Acquisition Method Editor** weiter bearbeiten. Klicken Sie im Modus **Acquire** auf **File > Open** und öffnen Sie dann die Methode, die mit dem **Method Wizard** erstellt wurde.

Nächste Schritte: Die neu erstellte Erfassungsmethode kann jetzt verwendet werden, um Daten zur vorläufigen Analyse zu erfassen.

Eine Erfassungsmethode mit dem „Acquisition Method Editor" erstellen

Tipp! Wenn Benutzer eine neue Erfassungsmethoden-Datei aus einer vorhandenen Rohdaten-Datei erstellen, können einige oder alle Peripheriegeräte-Methoden in der Erfassungsmethode verwendet werden, solange das Hardwareprofil übereinstimmt.

Im Fensterbereich **Acquisition Method** erscheinen nur die Geräte, die im aktiven Hardware-Profil konfiguriert wurden. Alle Geräte, die dem Hardware-Profil hinzugefügt wurden, müssen auch zu den bestehenden Aufnahmemethoden hinzugefügt werden. Weitere Informationen über Geräte finden Sie im *Peripheral Devices Setup Guide*.

1. Stellen Sie sicher, dass ein Hardware-Profil mit dem Massenspektrometer und einem Peripheriegerät aktiv ist.
2. In der Navigationsleiste doppelklicken Sie unter **Acquire** auf **Build Acquisition Method**.
3. Wählen Sie in der Registerkarte **Acquisition Method Properties** einen **Synchronization Mode** aus.
4. (Optional) Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Auto-Equilibration** und geben Sie die erforderliche Äquilibrierungszeit in Minuten ein.
5. Klicken Sie im Fensterbereich **Acquisition Method** auf das Symbol **Mass Spec**.
6. Wählen Sie einen **Scan**-Typ auf der Registerkarte **MS**.
7. Geben Sie in die Felder die gewünschten Werte ein. Siehe *Parameter auf Seite 56*.
8. Geben Sie in der Registerkarte **Advanced MS** gegebenenfalls Werte in die Felder ein.
9. Auf der Registerkarte **MS** klicken Sie auf **Edit Parameters**.
10. Geben Sie in der Registerkarte **Source/Gas** gegebenenfalls Werte in die Felder ein.
11. Geben Sie in der Registerkarte **Compound** gegebenenfalls Werte in die Felder ein und klicken Sie dann auf **OK**.
12. Klicken Sie auf das Symbol für ein Gerät und geben Sie dann die Parameter für das Gerät ein.
13. Fügen Sie weitere Zeiten und Experimente hinzu. Siehe *Experiment hinzufügen auf Seite 53* und *Einen Zeitabschnitt hinzufügen auf Seite 53*.
14. Klicken Sie auf **File > Save.**

Experiment hinzufügen

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Periode und dann auf **Add Experiment**.

   Ein Experiment wird für diese Periode unter dem letzten Experiment hinzugefügt.

   Hinweis: Ein Experiment kann nicht zwischen bestehenden Experimenten oder Perioden eingefügt werden. Benutzer können ein Experiment nur am Ende der Periode hinzufügen.

2. Wählen Sie im Teilfenster **Acquisition Method Editor** das entsprechende Gerät oder die entsprechenden Geräteparameter aus.

   Hinweis: Benutzer können in einem IDA Experiment nicht mehrere Perioden verwenden.

Einen Zeitabschnitt hinzufügen

- Im Fenster **Acquisition Method** klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das **Mass Spec** Symbol und klicken dann auf **Add Period**.

  Eine Periode wird unter der zuletzt erzeugten Periode hinzugefügt.

  Hinweis: Benutzer können innerhalb eines IDA Experimentes nicht mehrere Perioden verwenden.

Ein Experiment in eine Periode kopieren

1. Öffnen Sie eine mehrphasige Methode.
2. Im Fenster **Acquisition Method** drücken Sie die **STRG**-Taste und ziehen dann das Experiment auf die Periode.

   Das Experiment wird für diese Periode unter das letzte Experiment kopiert.

Ein Experiment innerhalb einer Periode kopieren

Mit diesem Verfahren können Sie einer Periode gleiche oder ähnliche Experimente hinzufügen, wenn die meisten oder alle Parameter gleich sind.

- Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Experiment und klicken dann auf **Copy this experiment**.

Eine Kopie des Experiments wird unter dem letzten erstellten Experiment hinzugefügt. Dies ist hilfreich, wenn dasselbe oder ähnliche Experiment(e) in einer Erfassungsmethode hinzugefügt werden.

Scan-Techniken

Das System ist vielfältig einsetzbar und zuverlässig und dient zur LC/MS-Analyse (Flüssigkeitschromatographie-Massenspektrometrie-Analyse) von flüssigen Probenströmen für die Identifizierung, Quantifizierung und Untersuchung polarer Verbindungen.

Das System verwendet die folgenden Massenspektrometrie-Techniken, um Proben zu analysieren:

- Zwei Modi für Einzel-Massenspektrometrie (MS):
  - Quadropol-basierte Einzel-Massenspektrometrie (dieser Modus wird ausschließlich für die Q1-Kalibrierung verwendet)
  - Flugzeit-basierte Einzel-Massenspektrometrie
- Zwei Modi der Tandem-Massenspektrometrie (MS/MS):
  - Produkt-Ionen-Massenspektrometrie
  - Vorläufer-Ionen-Massenspektrometrie

Einzel-Massenspektrometrie

Einzel-Massenspektrometrie (MS) wird zur Analyse geladener Moleküle verwendet, um das Molekulargewicht und die Menge der ermittelten Ionen zu ermitteln. Einzelne, durch MS ermittelte Ionen können auf das Vorhandensein eines Ziel-Analyten hinweisen.

Quadrupol-basierte Massenspektrometrie

In einem Quadrupol-basierten Einzel-Massenspektrometrie-Scan (Q1 MS) funktioniert das System als traditionelles Quadrupol-Massenspektrometer. In diesem Modus generiert das System Einzel-Massenspektrometrie-Informationen unter Verwendung des ersten Quadrupol-Abschnitts (Q1) des Geräts.

Einzel-Flugzeit-Massenspektrometrie

Bei einem TOF MS-Scan (Time-of-Flight Single Mass Spectrometry - Flugzeit-Einzel-Massenspektrometrie) erzeugt das System massenspektrometrische Informationen durch die Messung der Flugzeit gepulster Ionen von der orthogonalen Ablenkung bis zum Detektor. Ionen mit einem höheren Masse-zu-Ladungs-Verhältnis benötigen mehr Zeit, um die Flugstrecke zurück zu legen.

Tandem-Massenspektrometrie

Diese MS/MS-Technik ist geeignet für die Analyse von Mischungen, da, unter der Annahme, dass Produkt-Ionen ein eindeutiges m/z-Verhältnis haben, die charakteristischen Produkt-Ionen-Spektren für jede Komponente in einer Mischung erhalten werden können, ohne die anderen Komponenten zu stören.

Verwenden Sie die Tandemmassenspektrometrie zur gezielten Analyse spezifischer Vorläufer-/Produkt-Ionen, während die Probe eluiert. Dieser Analysetyp ist spezifischer als die Einzel-Massenspektrometrie, die nur basierend auf dem Masse-zu-Ladungs-Verhältnis unterscheidet.

Produkt-Ionen-Massenspektrometrie

Bei einem Produkt-Ionen-Scan (**Product Ion**) erzeugt das System massenspektrometrische Informationen durch Auswahl eines bestimmten Vorläufer-Ionen-Fensters in Q1, Fragmentieren in Q2 (eine Stoßzelle) und Analysieren der Ionen (Fragment-Ionen) in einer Flugrohr und Aufzeichnen ihrer genauen Ankunftszeit am Detektor. Produkt-Ionen können Informationen zur Molekularstruktur des ursprünglichen (Vorläufer-) Ions geben.

Vorläufer-Ionen-Massenspektrometrie

Bei einem Vorläufer-Ionen-Scan erkennt das System Vorläufer-Ionen, die ein spezifisches Produkt-Ion erzeugen. Das Instrument verwendet Q1 im Modus „Mass Resolving" (Massen-Auflösend), um über den relevanten Massenbereich zu scannen, während der Abschnitt „TOF" Produkt-Ionen-Spektren für jedes Vorläufer-Ion erfasst. Das Q1-Massenspektrum zeigt alle Vorläufer-Ionen an, die das relevante Ion erzeugen.

Über Spektraldatenaufnahme

Spektraldaten können in einem der in *Tabelle 8-1* beschriebenen Modi erfasst werden.

Tabelle 8-1 Spektraldaten

Modus	Beschreibung
Profil	Der voreingestellte Wert ist 0,1 Da. Profildaten sind die vom Massenspektrometer erzeugten Daten und entsprechen der Intensität, die bei einer Reihe von diskreten Massewerten mit gleichmäßigem Abstand aufgezeichnet wird. Zum Beispiel wird das Gerät bei dem Massenbereich von 100 Da bis 200 Da und einer Schrittweite von 0,1 Werte von 100 Da bis 200 Da in Schrittweiten von 0,1 Da messen (zum Beispiel 100,0, 100,1, 100,2, 100,3… bis zu 200,0).
Peak-Hopping	Der voreingestellte Wert ist 1,0 Da. Beim Peak-Hopping werden am Massenspektrometer große Schritte (etwa 1 Da) unternommen. Es hat den Vorteil, schneller zu sein (weniger Datenschritte werden benötigt), jedoch gehen Informationen über die Form von Peaks verloren.

Parameter

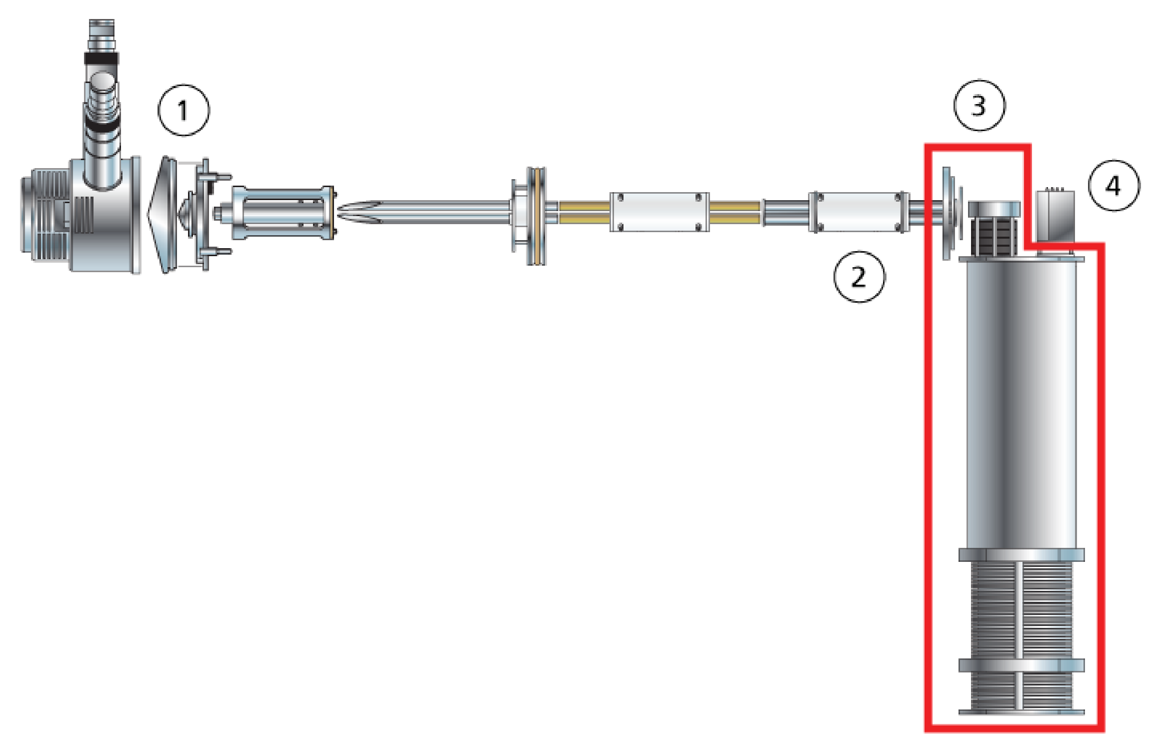
Arbeitsparameter bezeichnen den Satz der gerade verwendeten Instrumenten-Parameter.

- Quell- und Gasparameter: (Ionenquellenabhängig) Diese Parameter können sich in Abhängigkeit der verwendeten Ionenquelle ändern.
- Komponentenabhängige Parameter: Diese Parameter bestehen meist aus Spannungen auf der Ionenbahn. Die optimalen Werte für verbindungsabhängige Parameter variieren je nach analysierter Verbindung.
- Detektorparameter: Die folgenden Parameter beeinflussen den Detektor. Die Mehrkanal-Kapillare ist der Sensor in einem TOF-Instrument und bestehen aus vier Kanälen für den Ionennachweis. Die Summe der Kanäle entspricht der Ionenintensität. Dieser Parameter kann während der Geräteoptimierung angepasst werden.

Abbildung 8-1 zeigt die Lage der Parameter auf der optischen Ionenbahn an.



Abbildung 8-1 Optische Ionenbahn und Parameter



Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
1	IonSpray Voltage Floating (ISVF)	Quelle und Gas	Der ISVF-Parameter beeinflusst die Spray-Stabilität und dadurch die Empfindlichkeit. Hierbei handelt es sich um die angelegte Spannung an der Nadel, die die Probe versprüht.	Alle
1	Nebulizer Current (NC)	Quelle und Gas	Der NC-Parameter regelt den Strom, der an der Koronaentladungsnadel in der Ionenquelle für chemische Ionisation bei Atmosphärendruck (APCI) angelegt ist. Die Entladung ionisiert die Lösungsmittelmoleküle, was wiederum die Probenmoleküle ionisiert.	Alle
1	Interface Heater Temperature (IHT)	Quelle und Gas	Der IHT-Parameter steuert die Temperatur der NanoSpray® -Schnittstellenheizung und ist nur verfügbar, wenn die NanoSpray-Ionenquelle und die Schnittstelle installiert sind. Die optimale Heizungstemperatur hängt von der analysierten Probe und dem verwendeten Lösungsmittel ab. Ist die Heizungstemperatur zu hoch, verschlechtert sich das Signal. Normalerweise liegt die Heizungstemperatur im Bereich von 130 °C bis 180 °C. Die maximal einstellbare Heizungstemperatur beträgt 250 °C, allerdings ist diese für die meisten Anwendungen zu hoch. Für NanoSpray III-Quellen sollten Temperaturen zwischen 75 °C und 120 °C gewählt werden.	Alle
1	Ion Source Gas 1 (GS 1)	Quelle und Gas	Für die Turbo V™ -Ionenquelle steuert der GS1-Parameter das Zerstäubergas sowohl für die TurboIonSpray® -Sonde als auch die APCI-Sonde. Für die DuoSpray™ -Ionenquelle steuert der GS1-Parameter das Zerstäubergas für die TurboIonSpray-Sonde.	Alle
1	Ion Source Gas 2 (GS 2)	Quelle und Gas	Für die Turbo V™ -Ionenquelle steuert der GS2-Parameter das Heizergas für die TurboIonSpray® -Sonde. Für die DuoSpray™ -Ionenquelle steuert der GS2-Parameter das Heizergas für die TurboIonSpray-Sonde und das Zerstäubergas für die APCI-Sonde.	Alle

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
1	Temperature (TEM)	Quelle und Gas	Der TEM-Parameter steuert die Temperatur des Heizergases für die TurboIonSpray-Sonde oder die Temperatur der APCI-Sonde.	Alle
1	Curtain Gas (CUR)	Quelle und Gas	Der CUR-Parameter steuert den Gasfluss der Curtain Gas™ -Schnittstelle. Die Curtain Gas-Schnittstelle ist zwischen der Transferkapillare und der Blende angeordnet. Es verhindert eine Kontamination der Ionenoptik.	Alle
1	Declustering Potential (DP)	Verbindung	Der DP-Parameter steuert die Spannung an der Düse, welche das Auflösungsvermögen der Ionen zwischen der Düse und der QJet® -Ionenführung steuert. Damit minimiert man Lösungsmittel-Cluster, die auf Analytionen verbleiben können, nachdem sie in die Vakuumkammer eingetreten sind, und soweit erforderlich, benutzt sie um Ionen zu fragmentieren. Je höher die Spannung, desto höher ist die Energie, die auf die Ionen übertragen wird. Wenn der DP-Parameter zu hoch ist, kann es zu unerwünschter Fragmentierung kommen. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.	Alle
2	CAD Gas	Quelle und Gas	Der CAD-Parameter steuert den Druck des CAD-Gases in der Stoßzelle. Das Stoßgas hilft, die Ionen während des Durchlaufes durch die Stoßzelle zu fokussieren; die Voreinstellung für den CAD-Parameter ist der stationäre Modus. Für MS/MS-Scan-Typen hilft das CAD-Gas, die Vorläufer-Ionen zu fragmentieren. Wenn die Vorläufer-Ionen mit dem Stoßgas kollidieren, zerfallen sie und bilden Produkt-Ionen. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.	Alle

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
2	Collision Energy (CE)	Verbindung	Der CE-Parameter bestimmt die Potenzialdifferenz zwischen dem Q0-Bereich und der Q2-Stoßzelle. Er wird nur bei MS/MS-Scan-Typen verwendet. Dieser Parameter ist die Energiemenge, die auf die Vorläufer-Ionen einwirkt, wenn sie in die Q2-Stoßzelle hinein beschleunigt werden und mit Gasmolekülen kollidieren und fragmentieren. Je höher der Wert eingestellt ist, desto stärker ist die Fragmentierung. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.	TOF MS, TOF MS/MS
2	Collision Energy Spread (CES)	Verbindung	In Verbindung mit dem CE-Parameter bestimmt der CES-Parameter, welche drei diskreten Stoßenergien auf die Vorläufer-Masse in einem Produkt-Ionen-Scan einwirken, wenn CES verwendet wird. Die Kollisionsenergie wird schrittweise von niedrig bis hoch gesteigert. Im positiven Modus wird die Kollisionsenergie von CE – CES bis CE + CES erhöht. Durch die Eingabe eines CES-Wertes wird die Stoßenergie-Spreizung automatisch aktiviert. Dieser Parameter ist hilfreich, wenn Sie Verbindungen mit unterschiedlichen Stabilitäten analysieren möchten. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.	TOF MS/MS
3	Ion Release Delay (IRD)	Verbindung	Die Zeitmenge in Millisekunden vor dem Ionenimpuls. Der Standard (11 ms) wird basierend auf den TOF-Massen berechnet und kann vom Bediener angepasst werden. Der Bereich ist normalerweise 6 ms bis 333 ms. Dieser Parameter wird mit dem Assistenten **Instrument Optimization** optimiert, wenn die Option **Enhanced Ion** in den Optionen **Advanced** ausgewählt ist. Im Allgemeinen muss die Standardeinstellung nicht geändert werden.	Nur MS/MS, Erweitert

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
3	Ion Release Width (IRW)	Verbindung	Dies ist die Breite oder Dauer des Ionenimpulses in Millisekunden und wird basierend auf dem IRD berechnet. Der Bereich ist normalerweise 5 ms bis 328 ms mit einem Standardwert von 10 ms. Dieser Parameter wird mit dem Assistenten **Instrument Optimization** optimiert, wenn die Option **Enhanced Ion** in den Optionen **Advanced** ausgewählt ist. Im Allgemeinen muss die Standardeinstellung nicht geändert werden.	Nur MS/MS, Erweitert
4	MCP (CEM)	Detektor	Der CEM-Parameter steuert die Spannung, die auf den Detektor aufgebracht wird. Die Spannung beeinflusst das Detektorverhalten.	Alle

Betriebsanleitung – Batches 9

Ein Batch ist eine Sammlung von Informationen über eine zu analysierende Probe. Batches geben der Software an, in welcher Reihenfolge Proben zu analysieren sind. Informationen über das Importieren von Batches finden Sie im *Advanced User Guide*.

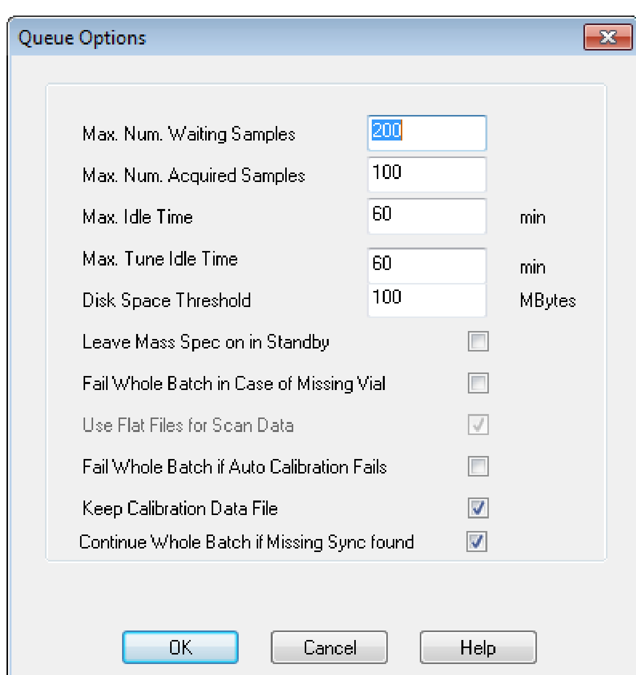
Optionen für Warteschlangen einstellen

Die Warteschlange arbeitet einen Schritt der Liste nach dem anderen ab und unterzieht jede Probe der ausgewählten Erfassungsmethode. Nachdem alle Proben erfasst wurden, stoppt die Warteschlange und das Gerät wechselt in den **Standby**-Modus. Im **Standby**-Modus werden die LC-Pumpen und die elektrische Spannung an einigen Instrumenten ausgeschaltet.

Die Länge der Wartezeit nach Abarbeitung der letzten Probe aus der Warteschlange, bevor die Analyst® TF Software das Gerät in **Standby** schaltet, kann durch den Nutzer bestimmt werden.. Weitere Informationen über die anderen Felder im Dialogfeld **Queue Optionen** siehe „Help".

1. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf **Configure**.
2. Klicken Sie auf **Tools > Settings > Queue Options.**

Abbildung 9-1 Dialogfeld „Queue Options"



3. Geben Sie in das Feld **Max. Num. Waiting Samples** die maximale Anzahl der Proben als einen Wert ein, der höher als die Anzahl der Proben ist, die an die Warteschlange übergeben werden.

4. Geben Sie in das Feld **Max. Idle Time** die Länge der Zeit ein, die eine Warteschlange nach einer Aufnahme warten soll, bevor sie in den **Standby**-Modus wechselt. Der voreingestellte Wert ist 60 Minuten.

   Wenn Sie für den Betrieb des Massenspektrometers Gasflaschen verwenden, stellen Sie diese Zeit so ein, dass das Gas in den Flaschen nicht aufgebraucht wird.

   Stellen Sie bei einem LC-Verfahren vor einem Lauf sicher, dass die Behälter genügend Lösungsmittel für alle Proben-Läufe und die maximale Stillstandszeit enthalten.
5. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Leave Mass Spec on in Standby**, um das Massenspektrometer nach dem Ende der Analyse weiter laufen zu lassen. Dank dieser Funktion können die Heizgeräte und Gase weiter laufen, auch nachdem die Geräte in den Status **Idle** versetzt wurden, sodass die Ionenquelle und der Eingang des Massenspektrometers frei von Kontamination gehalten werden.
6. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial**, um den gesamten Batch abzubrechen, wenn ein fehlendes Fläschchen erkannt wird. Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, wird nur die aktuelle Probe abgebrochen und die Warteschlange fährt mit der nächsten Probe fort.
7. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Fail Whole Batch if Auto Calibration Fails**, um den Batch zu stoppen, wenn die automatische Kalibrierung fehlschlägt.
8. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Keep Calibration Data File**, um die Kalibrierungs-Datendatei in einem Teilordner des Ordners „Data“ des Projekts aufzubewahren, aus dem Proben übergeben werden.
9. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Continue Whole Batch if Missing Sync found**, um den gesamten Batch weiter zu erfassen, wenn ein fehlendes Synchronisierungssignal festgestellt wird. Wenn dieses Kontrollkästchen nicht aktiviert ist, schlägt die aktuelle Probe fehl und die Warteschlange fährt nicht mit der nächsten Probe fort, wenn ein fehlendes Synchronisierungs-Signal festgestellt wird.

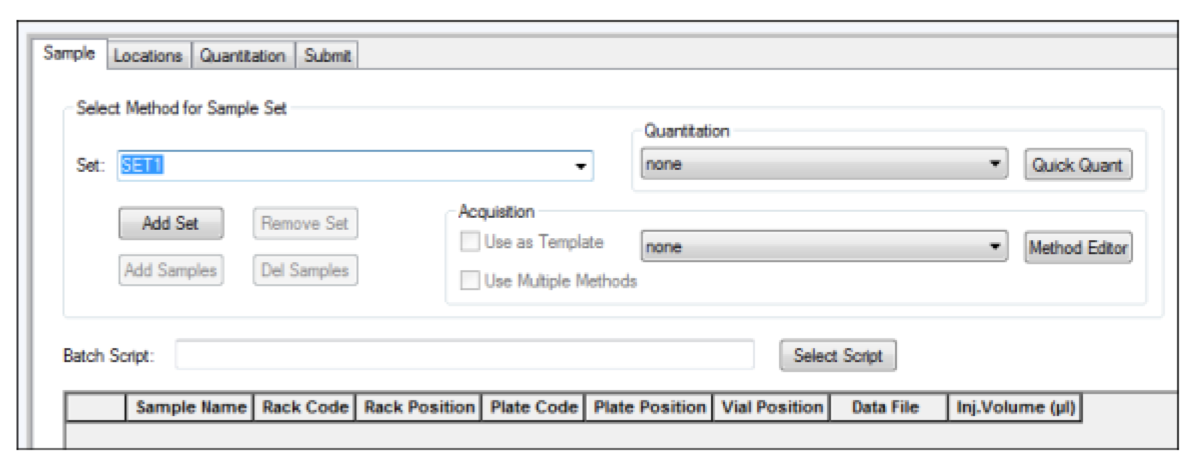
Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen

Ein Satz kann aus einer einzelnen Probe oder mehreren Proben bestehen.

Hinweis: Weitere Informationen darüber, wie man Quantifizierungsinformationen zu einem Batch hinzufügt, siehe *Advanced User Guide*.

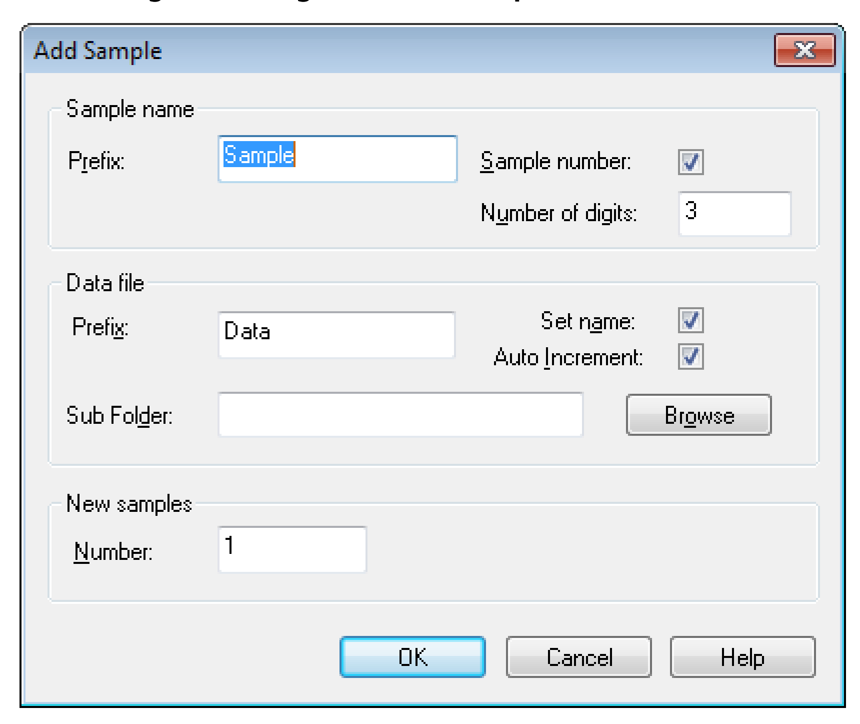
1. In der Navigationsleiste doppelklicken Sie unter **Acquire** auf **Build Acquisition Method**.

Abbildung 9-2 Dialogfeld „Batch Editor“



2. Geben Sie einen Namen in der Registerkarte **Sample** in der **Set**-Liste ein.
3. Klicken Sie auf **Add Set**.
4. Klicken Sie auf **Add Samples**, um Proben zum neuen Set hinzuzufügen.

Abbildung 9-3 Dialogfeld „Add Samples“



5. Geben Sie einen Namen für die Proben in diesem Set im Feld **Prefix** im Abschnitt **Sample name** ein.
6. Um eine automatisch steigende Nummerierung an das Ende eines Probennamen anzuhängen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Sample number**.

7. Wenn das Kontrollkästchen **Sample number** aktiviert ist, geben Sie die Anzahl der im Probennamen gewünschten Stellen im Feld **Number of digits** ein.

   Wird zum Beispiel „3" eingegeben, ergeben sich die Probennamen „samplename001", „samplename002" und „samplename003".

8. Geben Sie einen Namen für die Datei, die die Probeninformationen speichern soll, im Feld **Prefix** im Abschnitt **Data file** ein.
9. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Set name**, wenn der Set-Name als Teil des Dateinamen verwendet werden soll.
10. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Auto Increment**, damit Dateinamen automatisch aufsteigend nummeriert werden.
11. Geben Sie einen Namen im Feld **Sub Folder** ein.

    Der Ordner wird im Ordner **Data** des aktuellen Projektes gespeichert. Bleibt das **Sub Folder** leer, wird die **Data** Datei im Daten-Ordner gespeichert und kein Unterordner erstellt.

12. Im Abschnitt **New samples** geben Sie im Feld **Number** die Anzahl der neuen Proben ein.
13. Klicken Sie auf **OK**.

    Die Probentabelle wird mit dem Probennamen und Dateinamen ausgefüllt.

    Tipp! Im Rechtsklick-Menü stehen die Optionen **Fill Down** und **Auto Increment** stehen zur Verfügung, nachdem eine Spaltenüberschrift oder mehrere Zeilen in einer Spalte ausgewählt wurden.

14. In der Registerkarte **Sample** im Abschnitt **Acquisition** wählen Sie eine Methode aus der Liste aus.

    Je nachdem, wie das System eingerichtet ist, müssen bestimmte Informationen für den Autosampler eingegeben werden. Selbst wenn das Injektionsvolumen in der Methode eingestellt wurde, kann der Benutzer das Injektionsvolumen für eine oder mehrere Proben ändern, indem der Wert in der Spalte „Injection volume" verändert wird.

    Hinweis: Um verschiedene Methoden für einige der Proben in diesem Set zu verwenden, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use Multiple Methods**. Die Spalte **Acquisition Method** wird in der Tabelle **Sample** angezeigt. Wählen Sie für jede Probe die Aufnahmemethode in dieser Spalte.

15. Um die in der Methode aufgeführten Injektionsvolumina zu ändern, geben Sie das Injektionsvolumen in der Spalte **Inj. Volume (µl) das Injektionsvolumen für jede Probe ein.**
16. Geben Sie in der Spalte **Vial Position** die Positionen der Fläschchen ein.

    Hinweis: Um Proben automatisch über die Registerkarte **Locations** zu füllen, klicken Sie auf das erste und letzte Fläschchen in einem Satz mit gedrückter **Shift** (Umschalt)-Taste. Diese Fläschchen werden als rote Kreise dargestellt. Über die Registerkarte **Locations** können mehrere Injektionen aus dem gleichen Fläschchen erfolgen, indem Sie die **Ctrl** (Strg)-Taste gedrückt halten, während Sie die Fläschchenposition anklicken. Der rote Kreis wird grün.

17. (Optional) Verwenden Sie die in *Tabelle 9-1* angezeigten Verfahren nach Bedarf.

Tabelle 9-1 Batch Editor-Tipps

Um dies zu tun ...	... machen Sie folgendes
Um alle Werte in einer Spalte gleichzeitig zu ändern	klicken Sie auf eine Spaltenüberschrift und dann die rechte Maustaste. Aus dem Menü verwenden Sie die Befehle **Auto Increment** und **Fill Down**, um die Werte in der Spalte zu ändern. Dies funktioniert auch für mehrere Zellen in derselben Spalte.
Um eine vorhandene Aufnahmemethode zu ändern	wählen Sie die Methode aus der Liste und klicken dann auf **Method Editor**. Um eine neue Erfassungsmethode zu erstellen, wählen Sie aus der Liste **None** aus und klicken Sie dann auf **Method Editor**. Nur erfahrene Benutzer sollten diese Funktion verwenden. Verwenden Sie diese Funktion nicht, wenn die Option **Use Multiple Methods** ausgewählt ist.
Um eine zuvor erstellte Quantifizierungsmethode anzuwenden	wählen Sie die Methode aus der Liste **Quantitation** aus.
Um mehr als ein Well oder Vial gleichzeitig auszuwählen	halten Sie die **Shift** (Umschalt)-Taste gedrückt und klicken dann auf den/das erste(n) und letzte(n) Well oder Fläschchen im Bereich.

18. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus, wenn Sie die Probenpositionen festlegen wollen:
    - *Bestimmung der Probenpositionen im Batch Editor auf Seite 67*
    - *Mit der Registerkarte „Locations“ die Fläschchenpositionen bestimmen (optional) auf Seite 68*
19. Klicken Sie auf die Registerkarte **Submit**.
20. Wenn der Abschnitt **Submit Status** eine Meldung über den Status des Batches enthält, führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
    - Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch für die Übergabe bereit ist, fahren Sie mit Schritt 21 fort.
    - Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch nicht für die Übergabe bereit ist, nehmen Sie die Änderungen entsprechend der Meldung vor.
21. Klicken Sie auf **Submit**.

    Das Dialogfeld **Erfassung** wird geöffnet.
22. Speichern Sie die Datei.

Eine Probe oder einen Probensatz übergeben

1. Klicken Sie auf die Registerkarte **Submit** im **Batch Editor**.
2. Wenn der Abschnitt **Submit Status** eine Meldung über den Status des Batches enthält, führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
   - Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch für die Übergabe bereit ist, fahren Sie mit Schritt *3* fort.
   - Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch nicht für die Übergabe bereit ist, nehmen Sie die Änderungen entsprechend der Meldung vor.
3. Klicken Sie auf **Submit**.
4. Speichern Sie die Datei.

Probenkalibrierung einrichten

Die Software kann automatisch die externe Kalibrierung planen und ausführen, während Proben im Batch-Modus erfasst werden. Dies stellt sicher, dass eine gute Massengenauigkeit während der Datenerfassung erhalten wird. Wenn das CDS nicht konfiguriert ist, erfolgt die Kalibrierung mit einem Autosampler und die Benutzer müssen die Kalibrierungsmethde (*.dam) und die Fläschchen-Position der Kalibrierungsprobe angeben.

1. Klicken Sie im **Batch Editor** auf die Registerkarte **Calibrate**.
2. Geben Sie im Feld **Calibrate Every _ Samples** die Anzahl der Proben ein, die zwischen zwei Kalibrierungen erfasst werden sollen.
3. Wählen Sie in der **Calibrant Reference Table** eine Tabelle aus der Liste aller Kalibriermittel-Referenztabellen aus, die für die aktuelle Polarität verfügbar sind. Stellen Sie sicher, dass die ausgewählte Referenztabelle die korrekte **Calibrant Valve Position** hat.
4. Legen Sie die **CDS Inject Flow Rate** fest.

   Wenn der Batch übergeben wird, werden die Kalibrierungsproben in die Warteschlange eingefügt. Jeder Satz beginnt mit einer Kalibrierungsprobe. Die Kalibrierungsmethode wird mit AnalystCal_ und dem Namen der Erfassungsmethode benannt (zum Beispiel AnalystCal_TOF.dam). Wenn das CDS konfiguriert ist, erstellt die Software automatisch eine Kalibrierungsmethode, die der Erfassungsmethode entspricht, die für die nächste Probe in der Warteschlange verwendet wird. Kalibrierungsdaten werden in einer getrennten Datendatei für jede Kalibrierungsprobe gespeichert. Die Kalibrierungs-Datendatei wird mit dem Kalibrierungsbericht im Teilordner „Cal Data" gespeichert und mit Cal und dem Zeitstempel und dem Kalibrierungsproben-Index (z. B. Cal200906261038341.wiff) benannt, wenn die Option „Keep Calibration Data File" im Dialogfeld „Queue Options" ausgewählt ist. Der Kalibrierungsbericht wird mit Cal und dem Zeitstempel, dem Kalibrierungsproben-Index und dem Word-Bericht benannt (z. B. Cal20130822154447030_report.txt). Der Bericht zeigt die Kriterien zur Peak-Ermittlung, die Parameter und die Massen an, die für die Kalibrierung verwendet wurden. Er informiert die Benutzer, ob die Kalibrierung erfolgreich war. Der Bericht fasst ebenfalls die für die Kalibrierung verwendeten Parameter zusammen.

Reihenfolge der Proben ändern

Die Reihenfolge der Proben kann bearbeitet werden, bevor sie an die **Warteschlange** übergeben werden.

- In der Registerkarte **Submit**, doppelklicken Sie auf eine der weit links von der Tabelle angezeigten Nummern (ein sehr schwaches quadratisches Feld ist sichtbar) und ziehen Sie diese an die neue Position.

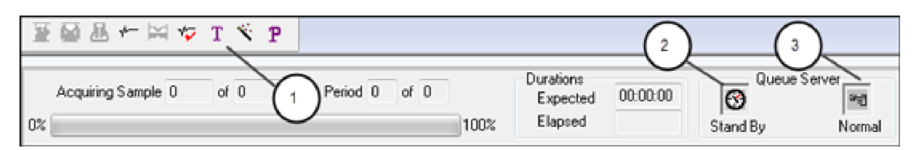
Daten erfassen

Das System sollte nicht im Modus **Tune and Calibrate** sein, wenn die Probenerfassung gestartet wird. Außerdem wird die Probenaufnahme automatisch gestartet, wenn das System an diesem Tag schon einmal gelaufen ist und noch nicht in den **Standby**-Modus versetzt worden ist.

1. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf **Acquire**.
2. Klicken Sie auf **View > Sample Queue.**

   Der **Queue Manager** wird geöffnet und zeigt alle übergebenen Proben an.

   Abbildung 9-4 Queue Manager



Position	Beschreibung
1	Das Symbol **Reserve Instrument for Tuning** sollte nicht eingedrückt sein.
2	Der Warteschlangen-Status sollte sich im Modus **Stand By** befinden.
3	Der Queue Server sollte sich im Modus **Normal** befinden. Siehe *Warteschlangenzustände auf Seite 70*.

3. Klicken Sie auf **Acquire > Start Sample.**

Hinweis: Es wird empfohlen, die Probe erneut zu verarbeiten wird, falls es zu einem Abbruch während der Probenerfassung gekommen ist.

Bestimmung der Probenpositionen im Batch Editor

Wenn in der Aufnahmemethode ein Autosampler verwendet wird, müssen die Positionen der Proben im Aufnahmebatch definiert werden. Definieren Sie die Position in der Registerkarte **Sample** oder in der Registerkarte **Locations**. Für weitere Informationen zum Erstellen von Batches siehe *Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen auf Seite 62*.

Hinweis: Je nach verwendetem Autosampler ist es eventuell nicht erforderlich, Details in weitere Spalten einzugeben.

1. In der **Set**-Liste in der Registerkarte **Sample** wählen Sie den Probensatz aus.
2. Für jede Probe im Satz gehen Sie ggf. folgendermaßen vor:
   - In der Spalte **Rack Code** wählen Sie den Rack-Typ.
   - In der Spalte **Rack Position** wählen Sie die Position des Racks im Autosampler.
   - In der Spalte **Plate Code** wählen Sie den Platten-Typ.
   - In der Spalte **Plate Position** wählen Sie die Position der Platte im Rack.
   - In der Spalte **Vial Position** bestimmen Sie die Position des Vials auf dem Träger oder im Fach.
3. Speichern Sie die Datei.

Mit der Registerkarte „Locations“ die Fläschchenpositionen bestimmen (optional)

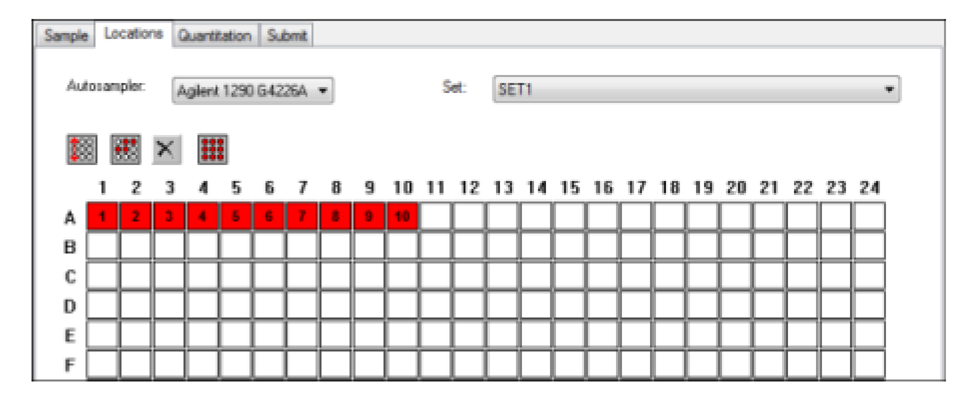
1. Klicken Sie auf die Registerkarte **Locations** im **Batch Editor**.
2. Wählen Sie den Probensatz in der Liste **Set** aus.
3. Wählen Sie den Autosampler in der **Autosampler**-Liste.

   Die entsprechende Anzahl der freien Racks für den Autosampler wird in der graphischen Darstellung der Racks angezeigt.
4. Wählen Sie mit der rechten Maustaste den Rack-Typ, der mit einem freien Rack verknüpft ist.

   Die Platten oder Wannen werden im Rack angezeigt.
5. Doppelklicken Sie auf eines der Rechtecke.

   Kreise erscheinen, welche die Wells oder Vials für die Träger darstellen.

Abbildung 9-5 Registerkarte „Locations“



6. Um festzulegen, ob Proben nach Zeilen oder Spalten gekennzeichnet werden, klicken Sie auf die Auswahl-Schaltfläche **Row/Column Selection**.

   Wenn die Schaltfläche eine rote horizontale Linie zeigt, markiert der **Batch Editor** die Proben nach Zeilen. Wenn die Schaltfläche eine rote vertikale Linie zeigt, markiert der **Batch Editor** die Proben nach Spalten.

7. Klicken Sie auf die Wells oder Vials in der Reihenfolge, in der sie analysiert werden sollen. Klicken Sie auf ein Wells oder ein Vial erneut, um sie zu deaktivieren.

8. Speichern Sie die Datei.

Tipp! Um Proben automatisch einzutragen, drücken Sie die **Shift**-Taste und klicken dann auf das erste und letzte Fläschchen in einem Satz. Um mehrere Injektionen aus demselben Fläschchen durchzuführen, drücken Sie die **Ctrl**-Taste und klicken dann auf die Position des Fläschchens. Der rote Kreis wird zu einem grünen Kreis.

Probenaufnahme beenden

Wenn eine Probenaufnahme gestoppt wird, wird der aktuelle Scan beendet, bevor die Aufnahme angehalten wird.

1. Im **Queue Manager** klicken Sie auf die Probe in der Warteschlange nach dem Punkt, an dem die Erfassung beendet werden soll.

2. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf **Acquire**.

3. Klicken Sie auf **Acquire > Stop Sample.**

   Die Warteschlange wird beendet, nachdem der aktuelle Scan der ausgewählten Probe abgeschlossen ist. Der Probenstatus im Fenster **Queue Manager (Local)** wird auf **Terminated** geändert und allen folgenden Proben in der Warteschlange werden auf **Waiting** gestellt.

4. Um die Bearbeitung des Batches fortzuführen, klicken Sie auf **Acquire > Start Sample.**

Batch Editor Rechtsklick-Menü

Rechtsklicken Sie in der Tabelle **Batch Editor**, um auf die Optionen zuzugreifen.

Menü	**Funktion**
Open	Öffnet eine Batch-Datei.
Import From	Importiert eine Datei.
Save As Batch	Speichert den Batch mit einem anderen Namen.
Save As a Template	Speichert den Batch als Vorlage ab (Gemeinsam mit der Funktion Sofortansicht verwendet).
Hide/Show Column	Blendet eine Spalte ein oder aus.

Menü	Funktion
Save Column Settings	Speichert die Spalteneinstellungen für den Batch.
Add Custom Column	Fügt eine benutzerdefinierte Spalte hinzu.
Delete Custom Column	Löscht eine benutzerdefinierte Spalte.
Fill Down	Kopiert die gleichen Daten in die ausgewählten Zellen.
AutoIncrement	Nummeriert die ausgewählten Zellen automatisch aufsteigend.
Delete Samples	Löscht die ausgewählte Zeile.
Select Autosampler	Wählt einen Autosampler aus.

Status der Warteschlange und des Gerätes

Der **Queue Manager** zeigt den Status von Warteschlange, Batch und Probe. Detaillierte Informationen zu einer bestimmten Probe in der Warteschlange können ebenfalls eingesehen werden.

Warteschlangenzustände

Der aktuelle Zustand der Warteschlange wird im **Queue Server** angezeigt.

Abbildung 9-6 Die Anzeige für den Queue Server zeigt den Modus „Normal“ an.

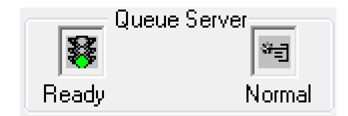
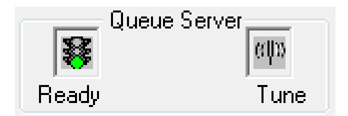


Abbildung 9-7 Die Anzeige für den Queue Server zeigt den Modus „Tune“ an.



Das erste Symbol zeigt den Status der Warteschlange. Das zweite Symbol zeigt an, ob sich die Warteschlange im **Tune**-Modus (zum Tuning) oder **Normal**-Modus (für die Bearbeitung von Proben) befindet. *Tabelle 9-2* beschreibt die Symbole und den Warteschlangenzustand.

Tabelle 9-2 Warteschlangenzustände

Symbole	Zustand	Definition
Queue Server Not Ready Normal	Not Ready	Das Hardware-Profil ist deaktiviert und die Warteschlange akzeptiert keine Probenübergaben.
Queue Server Stand By Normal	Stand By	Das Hardware-Profil wurde aktiviert, aber alle Geräte befinden sich im Leerlauf. Pumpen laufen nicht und Gase sind abgeschaltet.
Queue Server Warming Up Normal	Warming Up	Das Massenspektrometer und die Geräte werden äquilibriert, Säulen werden aufbereitet, die Autosampler-Nadel wird gereinigt und die Säulenöfen werden auf Temperatur gebracht. Die Dauer der Äquilibrierung wird vom Bediener ausgewählt. Aus diesem Zustand kann das System in den Zustand **Ready** gehen.
Queue Server Ready Normal	Ready	Das System ist bereit, Proben zu analysieren, und die Geräte wurden äquilibriert und sind einsatzbereit. In diesem Zustand kann die Warteschlange Proben aufnehmen und wird arbeiten, sobald Proben übergeben wurden.
Queue Server Waiting Normal	Warten	Das System beginnt automatisch mit der Aufnahme, sobald die nächste Probe übergeben wird.
Queue Server PreRun Normal	PreRun	Die Methode wird an jedes Gerät heruntergeladen und Geräte werden äquilibriert. Dieser Zustand tritt vor der Aufnahme jeder Probe in einem Batch ein.
Queue Server Acquiring Normal	Acquiring	Die Methode wird ausgeführt und die Datenaufnahme erfolgt.
Queue Server Paused Normal	Paused	Das System wurde während der Erfassung angehalten.

Anzeige der Symbole für Instrument und Geräte

Symbole für das Massenspektrometer und jedes Gerät der aktiven Hardware-Konfiguration erscheinen in der Statuszeile in der unteren rechten Ecke des Fensters. Der Benutzer kann den genauen Status einer LC-Pumpe anzeigen, um zu ermitteln, ob der LC-Pumpendruck angemessen ist, oder den genauen Status des Massenspektrometers anzeigen, um die Temperatur der Ionenquelle zu bestätigen.

Hinweis: Für jeden Status kann die Hintergrundfarbe Rot sein. Ein roter Hintergrund bedeutet, dass das Gerät, während es sich in diesem Zustand befindet, einen Fehler erkannt hat.

- Doppelklicken Sie in der Statusleiste auf das Symbol für das Gerät oder Massenspektrometer.

  Das Dialogfeld **Instrument Status** öffnet sich.

Tabelle 9-3 Symbole für Instrumenten- und Geräte-Status

Status	Symbol	Hintergrundfarbe	Beschreibung
Leerlauf		Grün oder gelb	Das Gerät läuft nicht. Wenn die Hintergrundfarbe Gelb ist, sollte das Gerät äquilibriert werden, damit es wieder betriebsbereit ist. Wenn die Hintergrundfarbe grün ist, ist das Gerät betriebsbereit.
Äquilibrieren		Grün oder gelb	Das Gerät äquilibriert.
Warten		Grün	Das Gerät wartet auf einen Befehl von der Software, von einem anderen Gerät oder auf bestimmte Maßnahmen durch den Bediener.
Läuft		Grün	Das Gerät verarbeitet einen Batch.
Abbruch		Grün	Das Gerät bricht den Vorgang ab.
Herunterladen		Grün	Eine Methode wird an das Gerät übertragen.
Ready		Grün	Das Gerät arbeitet nicht, ist aber betriebsbereit.
Fehler		Rot	Das Gerät ist auf einen Fehler gestoßen, der untersucht werden sollte.

Rechtsklick-Menü „Queue“

Durch Rechtsklick in der Tabelle **Queue** können Sie auf folgende Optionen zugreifen.

Menü	Funktion
Sample Details	Öffnet das Dialogfeld **Sample Details**.
Reacquire	Die Probe wird nochmals aufgenommen.
Insert Pause	Fügt eine Pause, in Sekunden, zwischen zwei Proben ein.
Delete	Löscht entweder den Batch oder die ausgewählten Proben.
Move Batch	Verschiebt den Batch innerhalb der Warteschlange.

Menü	Funktion
Sort	Sortiert nach der vorher ausgewählten Spalte.
Column Settings	Ändert die Spalteneinstellungen.

Bedienungsanleitung – Analyse und Verarbeitung von Daten 10

Verwenden Sie die Beispieldateien, die im Ordner **Example** installiert wurden und lernen Sie, wie Daten mit den gängigsten Analyse- und Bearbeitungs-Tools betrachtet und analysiert werden können. Weitere Informationen zu den folgenden Themen finden Sie im *Advanced User Guide*.

- Diagramme beschriften
- Überlagerung und Summierung von Spektren oder Chromatogrammen
- Hintergrundsubtraktionen durchführen
- Glätten der Daten
- Mit geglätteten Daten arbeiten
- Mit Strichspektrendaten arbeiten
- Mit Konturdiagrammen arbeiten
- Mit dem Fragment-Interpretations-Tool arbeiten
- Mit Bibliothek-Datenbanken und Bibliothek-Datensätzen arbeiten

Dateien öffnen

Tipp! Um das automatische Aktualisieren des Massenspektrums auszuschalten, klicken Sie mit der rechten Maustasteauf das Massenspektrum und klicken dann auf **Show Last Scan**. Wenn ein Häkchen neben **Show Last Scan** angezeigt wird, dann wird das Spektrum in Echtzeit aktualisiert.

1. In der Navigationsleiste unter **Explore** doppelklicken Sie auf **Open Data File**.
2. In der Liste **Data Files** navigieren Sie zu der zu öffnenden Datendatei, wählen eine Probe aus und klicken auf **OK**.

   Das Dialogfeld **Select Sample** wird geöffnet. Die aus der Probe aufgenommenen Daten werden angezeigt. Werden Daten noch immer aufgenommen, werden das Massenspektrum, die DAD/UV-Spur und TIC automatisch aktualisiert.

   Tipp! Um eine Beispiel-Datendatei anzuzeigen, stellen Sie sicher, dass das Projekt **Example** ausgewählt ist. Öffnen Sie den Ordner TOF und öffnen Sie dann die Datei **TOFMS PPGs3000.wiff**. Wählen Sie in der Probenliste **TOFMS** aus.

In einer Datei zwischen Proben navigieren

Hinweis: *Tabelle C-5 auf Seite 110* zeigt die in diesem Verfahren verwendeten Navigationssymbole. Wurden Proben in separaten Dateien gespeichert, dann öffnen Sie jede Datei einzeln.

- Öffnen Sie die Datendatei und führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Klicken Sie auf das Symbol mit dem nach rechts zeigenden Pfeil, um zur nächsten Probe in der Datendatei zu springen.
  - Klicken Sie auf das Symbol mit dem nach rechts geschwungenen Pfeil, um zu einer nicht darauf folgenden Probe zu springen.
  - Wählen Sie die Probe aus der Liste **Sample** im Dialogfeld **Select Sample** aus.
  - Klicken Sie auf das Symbol mit dem nach links zeigenden Pfeil, um zur vorherigen Probe in der Datendatei zu springen.

Versuchsbedingungen anzeigen

Die experimentellen Bedingungen, die zur Sammlung von Daten verwendet werden, sind in der Datei mit den Ergebnissen gespeichert. Die Informationen enthalten Details zur angewandten Erfassungsmethode: die MS-Erfassungsmethode (das heißt, die Anzahl der Perioden, Experimente und Zyklen) einschließlich Geräteparameter und HPLC-Geräte-Methoden (LC-Pumpendurchfluss). Darüber hinaus enthalten sie auch MS-Auflösungs- und Massen-Kalibrierungstabellen für die angewendete Probenaufnahme. *Tabelle 10-1* zeigt die zur Verfügung stehende Software-Funktionalität, wenn der Benutzer Datei-Informationen betrachtet.

- Klicken Sie auf **Explore > Show > Show File Information.**

  Das Teilfenster **File Information** wird unter der Grafik geöffnet.

  Tipp! Um eine Aufnahmemethode im **File Information**-Fenster zu erstellen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das **File Information**-Fenster und klicken dann auf **Save Acquisition Method**.

Tabelle 10-1 Rechtsklick-Menü für Teilfenster Show File Information

Menü	Funktion
Copy	Kopiert die ausgewählten Daten
Paste	Fügt Daten ein.
Select All	Wählt alle Daten im Fensterbereich aus.
Save To File	Speichert Daten als Rich Text Format (rtf) Datei.
Font	Ändert die Schriftart.
Save Acquisition Method	Speichert die Erfassungsmethode als .dam-Datei.

Tabelle 10-1 Rechtsklick-Menü für Teilfenster Show File Information (Fortsetzung)

Menü	Funktion
Save Acquisition Method to CompoundDB	Öffnet das Dialogfeld **Specify Compound Information**. Wählen Sie die **IDs** und Molekulargewichte aus, die in der Datenbank für chemische Verbindungen gespeichert werden sollen.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

Daten in Tabellenform anzeigen

1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show List Data.**

   Die Daten werden in einem Fenster unter der Grafik angezeigt.

Abbildung 10-1 Registerkarte „Peak List“

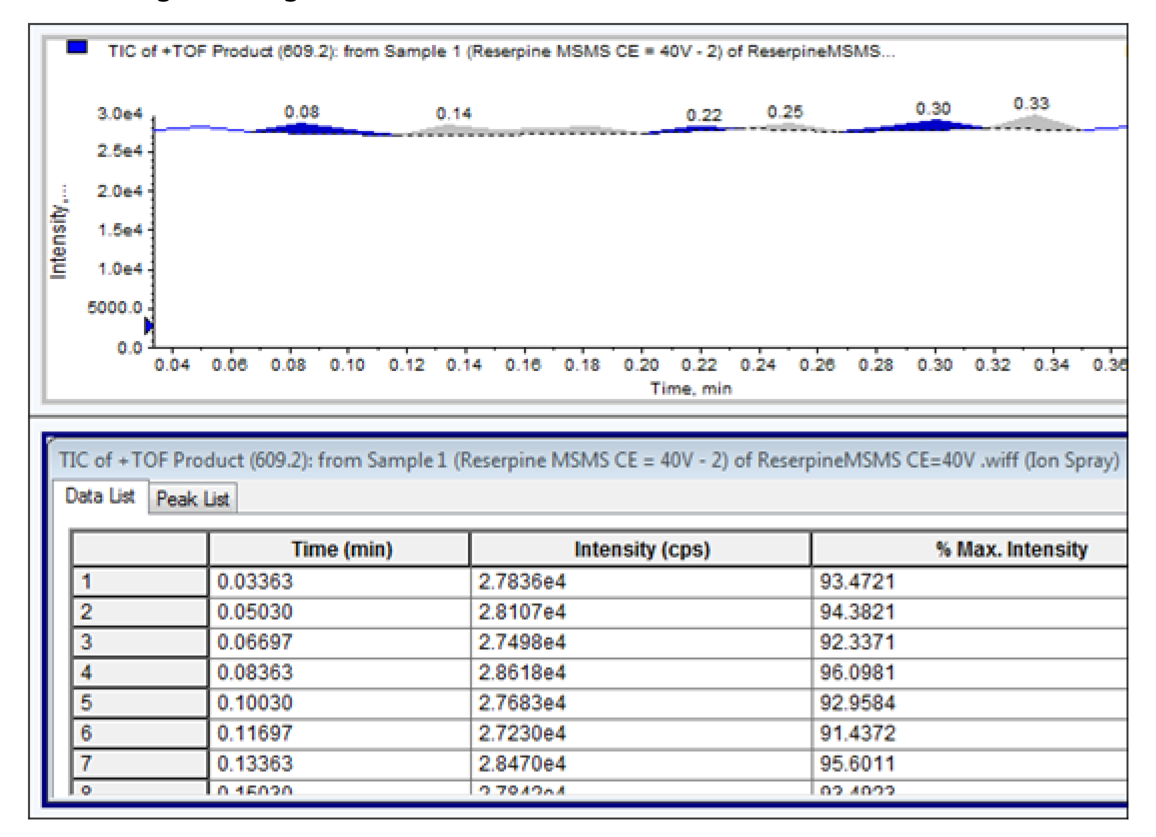


Tabelle 10-2 Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Spectral Peak List“

Menü	Funktion
Spaltenoptionen	Öffnet das Dialogfeldfeld **Select Columns for Peak List**.
Save As Text	Speichert die Daten als .txt-Datei.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

Tabelle 10-3 Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Chromatographic Peak List“

Menü	Funktion
Show Peaks in Graph	Zeigt die Peaks in zwei Farben im Diagramm an.
IntelliQuan Parameters	Öffnet das Dialogfeldfeld **Intelliquan**.
Save As Text	Speichert die Daten als .txt-Datei.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

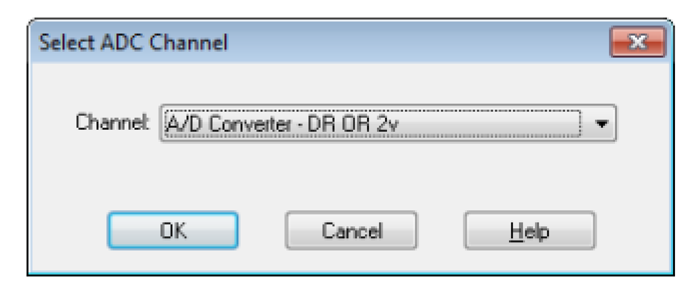
ADC-Daten anzeigen

Analog-Digital-Wandler (ADC)-Daten werden durch einen sekundären Sensor aufgenommen (beispielsweise von einem UV-Sensor durch eine ADC-Karte) und eignen sich für einen Vergleich mit Massenspektrometer-Daten. Um ADC-Daten zur Verfügung zu stellen, nehmen Sie die ADC-Daten und Massenspektrometer-Daten gleichzeitig auf und speichern sie in der gleichen Datei ab.

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die ADC-Daten enthält.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show ADC Data.**

   Das Dialogfeld **Select ADC Channel** wird geöffnet.

   Abbildung 10-2 Dialogfeld „Select ADC Channel“

3. Wählen Sie einen Kanal in der Liste **Channel** aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.

   Der ADC-Daten werden in einem neuen Fenster unter dem aktiven Fenster geöffnet.

Grundlegende quantitative Daten anzeigen

1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show List Data**.
3. Klicken Sie in der Registerkarte **Peak List** mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Show Peaks in Graph**.

   Peaks werden in zwei Farben angezeigt.
4. Um die Einstellungen für den Algorithmus zum Finden von Peaks zu ändern, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen dann **Analyst Classic Parameters** oder **Intelliquan Parameters**, je nachdem, welcher aktiv ist.
5. (Optional) Um die farbigen Peaks zu entfernen, klicken Sie mit der rechten Maustaste in der Registerkarte **Peak List** und löschen dann **Show Peaks in Graph**.

Chromatogramme

Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen siehe *Tabelle 10-8 auf Seite 88*.

Tabelle 10-4 Chromatogramm-Arten

Chromatogramm-Arten	Ziel
TIC (Total Ion Chromatogram - Gesamtionenchromatogramm)	Eine chromatographische Anzeige, die durch Auftragen der Intensität aller Ionen in einem Scan als Funktion von Zeit oder Anzahl der Scans generiert wird. Wenn eine Datendatei geöffnet wird, wird sie standardmäßig als TIC geöffnet. Enthält ein Experiment nur einen Scan, wird es als Spektrum angezeigt. Wird das Kontrollkästchen **MCA** während der Aufnahme der Datendatei aktiviert, dann wird die Datei für das Massenspektrum geöffnet. Wird das Kontrollkästchen **MCA** nicht aktiviert, dann wird die Datendatei als TIC geöffnet.
XIC (Extracted Ion Chromatogram - Auszug aus dem Ionenchromatogramm)	Ein Ionenchromatogramm wird erstellt, indem Intensitätswerte bei einem diskreten Massenwert oder Massenbereich aus einer Reihe von massenspektrometrischen Scans verwendet werden. Es zeigt das Verhalten einer bestimmten Masse oder Massenbereiches als Funktion der Zeit.
BPC (Basepeakchromatogramm)	Eine chromatographische Kurve, die die Intensität des jeweils intensivsten Ions innerhalb eines Scans im Vergleich zur Zeit oder Anzahl der Analysen zeigt.

Tabelle 10-4 Chromatogramm-Arten (Fortsetzung)

Chromatogramm-Arten	Ziel
TWC (Total Wavelength Chromatogram - Gesamtwellenlängen-Chromatogramm)	Bei einer chromatographischen Anzeige werden alle Absorptionswerte im aufgenommenen Wellenlängenbereich summiert und die Werte als Funktion der Zeit aufgetragen. Es besteht aus den summierten Absorptionen aller Ionen in einem Scan, die für einen chromatographischen Bereich als Funktion der Zeit aufgetragen werden.
XWC (Extracted Wavelength Chromatogram - Extrahiertes Wellenlängen-Chromatogramm)	Eine Teilmenge von TWC. Ein XWC zeigt die Absorption für einer bestimmten Wellenlänge oder die Summe der Absorption für Wellenlängenbereiche.
DAD (Diode Array Detector - Diodenarray-Detektor)	Ein UV-Detektor überwacht das Absorptionsspektrum der eluierenden Verbindungen bei einer oder mehreren Wellenlängen.

TIC's aus einem Spektrum erzeugen

- Klicken Sie auf **Explore > Show > Show TIC.**

  Das TIC wird in einem neuen Fenster geöffnet.

  Tipp! Klicken Sie mit der rechten Maustaste in ein Fenster mit einem Spektrum klicken und dann auf **Show TIC**.

Ein Spektrum aus einem TIC anzeigen

1. Wählen Sie einen Bereich aus einem Teilfenster mit einem TIC.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Spectrum.**

   Das Spektrum wird in einem neuen Fenster geöffnet.

   Tipp! Doppelklicken Sie im Fensterbereich **TIC** auf eine bestimmte Zeit, um das Spektrum anzuzeigen.

Über das Generieren von XICs

XICs können nur mit den Chromatogrammen oder Spektren für eine einzige Periode und ein einziges Experiment generiert werden. Um ein XIC aus Daten für mehrere Perioden oder mehrere Experimente zu erhalten, müssen Sie die Daten durch Klicken auf das Dreieck unter der X-Achse in einzelne Teilfenster aufteilen. Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen siehe *Tabelle 10-8 auf Seite 88*.

Es gibt mehrere Verfahren zum Extrahieren von Ionen zur Erzeugung eines XIC, je nachdem, ob chromatographische oder spektrale Daten verwendet werden. *Tabelle 10-5* enthält einer Zusammenfassung der Verfahren, die mit Chromatogrammen und Spektren angewendet werden können.

Tabelle 10-5 Zusammenfassung der Methoden zur XIC-Erstellung

Methode	Mit Chromatogramm verwenden	Mit Spektrum verwenden	Extraktion
Selected range	Nein	Ja	Extrahiert Ionen aus einem ausgewählten Bereich in einem Spektrum.
Maximum	Nein	Ja	Extrahiert Ionen aus einem ausgewählten Bereich in einem Spektrum und verwendet dazu den intensivsten Peak im ausgewählten Bereich. Diese Option erzeugt ein XIC unter Verwendung der maximalen Masse aus dem ausgewählten Spektralbereich.
Base peak masses	Ja	Ja	Kann nur bei Basepeakchromatogrammen (BPCs) verwendet werden. Die Verwendung des Befehl **Use Base Peak Masses** zur Extraktion von Ionen ergibt ein XIC mit einer andersfarbigen Linie für jede Masse. Wenn die Auswahl mehrere Peaks umfasst, wird die resultierende XIC die gleiche Anzahl von Linien mit einer anderen Farbe für jede Masse haben.
Specified masses	Ja	Ja	Extrahiert Ionen aus jeder Art von Spektrum oder Chromatogramm. Wählen Sie bis zu zehn Anfangs- und Endmassen, für die XICs generiert werden sollen.

Ein XIC mit einem ausgewählten Bereich generieren

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die Spektren enthält.
2. Wählen Sie einen Bereich aus, indem Sie die linke Maustaste am den Anfang des Bereichs klicken und mit gedrückter Maustaste den Mauszeiger an den Endpunkt ziehen und die linke Maustaste dort loslassen.

   Die Auswahl wird Blau angezeigt.
3. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Range.**

   Ein XIC für die Auswahl wird in einem Teilfenster unterhalb des Spektrum-Teilfensters geöffnet. Die Experiment-Informationen oben im Fenster zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

Ein XIC mit dem maximalen Peak generieren

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die Spektren enthält.
2. Bereich auswählen

   Die Auswahl wird Blau angezeigt.
3. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Maximum.**

   Ein XIC für den ausgewählten maximalen Peak öffnet sich in einem Fenster unterhalb des Spektrum-Fensters. Die Experiment-Informationen oben im Fenster zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

Ein XIC mit den Basepeak-Massen generieren

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die Spektren enthält.
2. In einem BPC wählen Sie den Peak, aus dem Ionen extrahiert werden sollen.

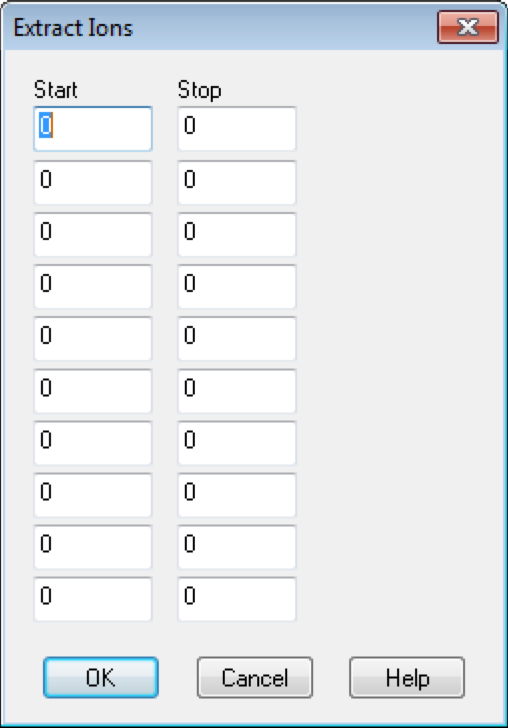
   Die Auswahl wird Blau angezeigt.
3. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Base Peak Masses.**

   Ein XIC für die getroffene Auswahl öffnet sich unterhalb dem Spektrum-Fenster. Die Experiment-Informationen auf der Fensteroberseite zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

Ionen durch Auswählen von Massen extrahieren

1. Öffnen Sie ein Spektrum oder Chromatogramm.
2. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Dialogfeld.**

Abbildung 10-3 Dialogfeld Extract Ions



3. Geben Sie die Werte für jede zu erstellende XIC ein. Falls kein Endwert eingegeben wird, wird der Bereich durch den Anfangswert definiert.
   - Im Feld **Start** geben Sie den Anfangswert (kleinerer Wert) für den Massenbereich ein.
   - Im Feld **Stop** geben Sie den Endwert (größerer Wert) für den Massenbereich ein.
4. Klicken Sie auf **OK**.

   Ein XIC für die getroffene Auswahl öffnet sich unterhalb dem Chromatogramm-Fenster. Die Experiment-Informationen oben im Fenster enthält die Massen und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

BPCs generieren

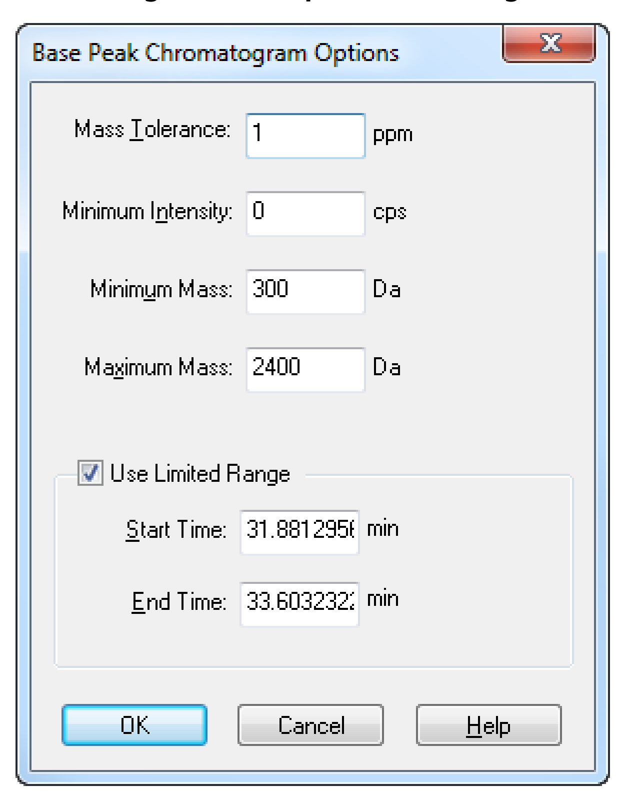
BPCs können nur mit den Daten für eine einzige Periode und ein einziges Experiment generiert werden.

1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Wählen Sie einen Bereich innerhalb eines TIC.

   Die Auswahl wird Blau angezeigt.
3. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Base Peak Chromatogram.**

   Die Auswahl wird in den Feldern **Start Time** und **End Time** angezeigt.

Abbildung 10-4 Basispeakchromatogramm-Optionen



4. Im Feld **Mass Tolerance** geben Sie den Wert ein, der den zu verwendenden Massenbereich zum Finden eines Peaks anzeigt. Die Software findet den Peak über den zweifachen Wert, der für den Bereich eingegeben wurde (± Massenwert).
5. Geben Sie im Feld **Minimum Intensity** die Intensität ein, unter der Peaks vom Algorithmus ignoriert werden.
6. Geben Sie im Feld **Minimum Mass** die Masse ein, die den Anfang des Scanbereiches bestimmt.
7. Geben Sie im Feld **Maximum Mass** die Masse ein, die das Ende des Scanbereiches bestimmt.
8. Um die Start- und Endzeit festzulegen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use Limited Range** und machen Folgendes:

    - Im Feld **Start Time** geben Sie die Zeit ein, die den Beginn des Experiments bestimmt.
    - Im Feld **End Time** geben Sie die Zeit ein, die das Ende des Experiments bestimmt.

9. Klicken Sie auf **OK**.

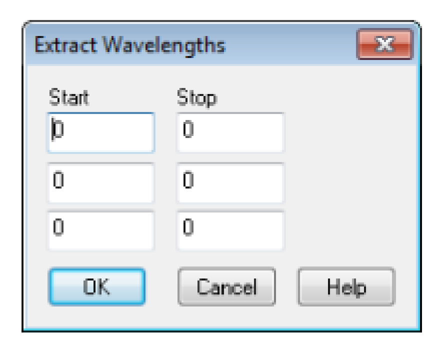
   Der BPC wird in einem neuen Fenster erzeugt.

XWCs generieren

Sie können bis zu drei Bereiche aus einem DAD-Spektrum extrahieren, um den XWC zu generieren. Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen siehe *Tabelle 10-8 auf Seite 88*.

1. Öffnen Sie eine Datei, die ein DAD-Spektrum enthält.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste an einer beliebigen Stelle im Fensterbereich und dann auf **Extract Wavelengths**.

Abbildung 10-5 Dialogfeld „Extract Wavelengths“



3. Geben Sie **Start**- und **Stop** ein.
4. Klicken Sie auf **OK**.

   Ein XWC öffnet sich in einem Fenster unterhalb dem DAD-Spektrum.

DAD-Daten anzeigen

Wie Massenspektrometer-Daten können Sie DAD-Daten als Chromatogramm oder Spektrum anzeigen.

1. Öffnen Sie eine Datei, die mit einem DAD aufgenommenen Daten enthält.

   Ein TWC, das analog zu einem TIC ist, öffnet sich in einem Fenster unterhalb des TIC.
2. Klicken Sie im Teilfenster **TWC** auf einen Punkt, um einen bestimmten Zeitpunkt auszuwählen oder markieren einen Bereich des Spektrums, um einen Zeitbereich auszuwählen.
3. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show DAD Spectrum.**

   Die DAD-Spektrum öffnet sich in einem Fenster unterhalb des TWC. Die Y-Achse zeigt die Absorption und die X-Achse zeigt die Wellenlänge.

   Tipp! Wenn das Teilfenster mit dem TWC geschlossen ist, klicken Sie auf einen beliebigen Punkt im TWC, um es erneut zu öffnen. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show DAD TWC.**

TWCs generieren

Ein TWC zeigt die gesamte Absorption (mAU) auf der y-Achse als Funktion der Zeit auf der x-Achse an. Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Optionen siehe *Tabelle 10-8 auf Seite 88*.

1. Öffnen Sie eine Datei, die ein DAD-Spektrum enthält.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show DAD TWC.**

Das TWC öffnet sich in einem Fenster unterhalb des DAD-Spektrums.

Tipp! Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Fenster mit einem DAD-Spektrum und klicken dann auf **Show DAD TWC**.

Schwellenwert anpassen

Der Schwellenwert ist eine unsichtbare Linie parallel zur x-Achse eines Diagramms, der eine Grenze zieht, unterhalb der die Software die Peaks in einem Spektrum nicht mehr berücksichtigt. Die Linie hat einen Griff, der als blaues Dreieck auf der linken Seite der y-Achse dargestellt wird. Klicken Sie auf das blaue Dreieck und Sie sehen eine gestrichelte Linie, die den Schwellenwert repräsentiert. Der Schwellenwert kann angehoben oder abgesenkt werden, aber eine Änderung des Schwellenwertes verändert keine Daten. Die Software markiert keine Peaks für den Bereich, die unter dem Schwellenwert liegen.

1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

   - Um den Schwellenwert zu erhöhen, ziehen Sie das blaue Dreieck auf der y-Achse nach oben. Um den Schwellenwert zu senken, ziehen Sie das blaue Dreieck nach unten.
   - Klicken Sie auf **Explore > Set Threshold.** Geben Sie dann im sich öffnenden Dialogfeld **Threshold Options** den Schwellenwert ein und klicken Sie dann auf **OK**.
   - Klicken Sie auf **Explore > Threshold.**

   Das Diagramm wird aktualisiert und zeigt den neuen Schwellenwert. Die Beschriftung von Peaks und die Liste der Peaks werden ebenfalls aktualisiert.

Chromatogramm-Teilfenster

Tabelle 10-6 Rechtsklick-Menü für Chromatogramm-Teilfenster

Menü	Funktion
List Data	Listet die Datenpunkte auf und integriert die in Chromatogrammen ermittelten Peaks.
Show Spectrum	Erzeugt ein neues Teilfenster mit dem Spektrum.
Show Contour Plot	Zeigt eine farbkodierte Linie für einen Datensatz, wobei die Farbe für die Intensität der Daten an diesem Punkt steht. Nur bestimmte MS-Modi werden unterstützt.
Extract Ions	Extrahiert ein bestimmtes Ion oder einen bestimmten Satz von Ionen aus einem ausgewählten Teilfenster und erzeugt dann ein neues Teilfenster mit einem Chromatogramm für die jeweiligen Ionen.
Show Base Peak Chromatogram	Erzeugt ein neues Fenster mit einem Basepeakchromatogramm.
ADC-Daten anzeigen	Erzeugt ggf. ein neues Fenster mit der UV-Daten-Linie.

Tabelle 10-6 Rechtsklick-Menü für Chromatogramm-Teilfenster (Fortsetzung)

Menü	Funktion
Show UV Detector Data	Erzeugt ggf. ein neues Fenster mit der UV-Daten-Linie.
Spectral Arithmetic Wizard	Öffnet den Spectral Arithmetic Wizard (Assistent zur arithmetischen Spektrenbearbeitung)
Save to Text File	Erzeugt eine Textdatei des Fensterausschnittes, die in Microsoft Excel oder anderen Programmen geöffnet werden kann.
Save Explore History	Speichert Informationen zu Änderungen an Verarbeitungsparametern, die auch **Processing Options** genannt werden und die vorgenommen wurden, während eine .wiff-Datei im Modus **Explore** verarbeitet wurde. Das Verarbeitungsprotokoll wird in einer Datei mit der Erweiterung .EPH gespeichert.
Add Caption	Fügt einen Text an der Cursor-Stelle im Fensterbereich ein.
Add User Text	Fügt ein Textfeld an der Mauszeiger-Position im Teilfenster ein.
Set Subtract Range	Legt den Subtraktionsbereich im Fenster fest.
Clear Subtract Range	Löscht den Subtraktionsbereich im Fenster.
Subtract Range Locked	Sperrt oder entsperrt den Subtraktionsbereich. Wenn die Subtraktionsbereiche nicht gesperrt sind, kann jeder Subtraktionsbereich unabhängig voneinander bewegt werden. Die Subtraktionsbereiche sind gesperrt voreingestellt.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

Spektren-Teilfenster

Tabelle 10-7 Rechtsklick-Menü für Spektren-Teilfenster

Menü	Funktion
List Data	Listet Datenpunkte auf und integriert Chromatogramme.
TIC anzeigen	Erzeugt ein neues Fenster mit TIC.
Extract Ions (Use Range)	Extrahiert ein bestimmtes Ion oder einen bestimmten Satz von Ionen aus einem ausgewählten Teilfenster und erzeugt dann ein neues Teilfenster mit einem Chromatogramm für die jeweiligen Ionen.
Extract Ions (Use Maximum)	Extrahiert Ionen und verwendet dazu den intensivsten Peak in einem ausgewählten Bereich.
Save to Text File	Erzeugt eine Textdatei des Fensterausschnittes, die in Excel oder anderen Programmen geöffnet werden kann.

Tabelle 10-7 Rechtsklick-Menü für Spektren-Teilfenster (Fortsetzung)

Menü	Funktion
Save Explore History	Speichert Informationen zu Änderungen an Verarbeitungsparametern, die auch **Processing Options** genannt werden und die vorgenommen wurden, während eine .wiff-Datei im Modus **Explore** verarbeitet wurde. Das Verarbeitungsprotokoll wird in einer Datei mit der Erweiterung .EPH gespeichert.
Add Caption	Fügt einen Text an der Cursor-Stelle im Fensterbereich ein.
Add User Text	Fügt ein Textfeld an der Mauszeiger-Position im Teilfenster ein.
Show Last Scan	Zeigt den Scan vor der Auswahl.
Select Peaks For Label	In diesem Dialog wählen Sie die Parameter zur Kennzeichnungen von Peaks.
Re-Calibrate TOF	Öffnet das Dialogfeld **TOF Calibration**.
Abscissa (Time)	Wechselt die Anzeige, um TOF-Werte auf der X-Achse anzuzeigen.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.
Add a Record	Fügt Datensätze und verbindungsbezogene Daten einschließlich Spektren zur Bibliothek hinzu. Hierzu muss ein Spektrum aktiviert sein.
Search Library	Durchsucht die Bibliothek ohne Bedingungen oder mit zuvor gespeicherten Bedingungen.
Set Search Constraints	Durchsucht die Bibliothek mit den Kriterien, die im Dialogfeld **Search Constraints** eingegeben wurden.

Datenverarbeitung

Graphische Daten können auf viele Arten verarbeitet werden. Dieser Abschnitt enthält Informationen und Verfahren zur Verwendung der am häufigsten verwendeten Tools.

Der User kann sowohl in Spektren wie auch Chromatogramme einen Teil einer Grafik vergrößern (zoomen) um einen bestimmten Peak oder eine Fläche genauer zu sehen. Der Benutzer kann immer wieder vergrößern, um noch kleinere Peaks zu sehen.

Es wird empfohlen, dass die Benutzer die Teileinstellungs-Funktionen in der Software nicht verwenden.

Diagramme

Die gleichen Daten können auf verschiedene Weise untersucht werden. Daten können zum Vergleich vor einer Berarbeitung wie Glättung oder Subtraktion gespeichert werden.

Ein Fenster enthält eines oder mehrere Teilfenster, die so angeordnet sind, dass alle Teilfenster vollständig sichtbar sind und sich nicht überlappen.

Teilfenster können eine variable oder feste Größe haben. Teilfenster werden innerhalb eines Fensters automatisch als Kacheln in Spalten und Zeilen angeordnet. Wenn die Größe eines Fensters geändert wird, passen sich die übrigen Teilfenster innerhalb des Fensters automatisch an die neue Größe an. Die Größe eines Fensters kann nicht so verändert werden, dass Teilfenster kleiner als ihre minimale Größe werden.

Zwei oder mehrere Fenster oder Teilfenster mit ähnlichen Daten können verknüpft werden, zum Beispiel Spektren mit ähnlichem Massenbereich. Wird ein Fenster oder Teilfenster vergrößert, vergrößern sich die anderen Teilfenster gleichzeitig. Zum Beispiel kann ein User ein XIC mit einem BPC verknüpfen, aus dem das XIC extrahiert wurde. Vergrößert man das BPC, so wird auch das XIC vergrößert, wodurch beide Chromatogramme die gleiche Vergrößerung haben.

Daten verwalten

- Verwenden Sie die folgenden Menüoptionen oder Symbole, um Daten in Diagrammen zu verwalten.

Tabelle 10-8 Diagramm-Optionen

Um dies zu tun ...	verwenden Sie diese Menüoption ...	... oder klicken Sie auf dieses Symbol
Eine Grafik in ein neues Fenster kopieren	Das zu kopierende Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Explore > Duplicate Data > In New Window.**	
Diagramme/Graphen wieder auf die ursprüngliche Größe skalieren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Explore > Home Graph.**	

Tabelle 10-8 Diagramm-Optionen (Fortsetzung)

Um dies zu tun ...	verwenden Sie diese Menüoption ...	... oder klicken Sie auf dieses Symbol
Verschieben eines Fensters	• Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Window > Move Pane.** • Wählen Sie das Teilfenster oder Fenster aus und ziehen es dann an die neue Position. Diese Position kann im gleichen Fenster oder in einem anderen Fenster sein. Ein Pfeil mit vier Spitzen wird angezeigt, wenn der Cursor auf den Rand des aktiven Fensters oder Teilfensters trifft. • Wenn das Teilfenster am oberen oder unteren Rand des Ziel-Teilfensters ist, verschiebt sich das Teilfenster entsprechend darüber oder darunter. • Wenn das Teilfenster am rechten oder linken Rand des Ziel-Teilfensters ist, verschiebt sich das Teilfenster entsprechend nach links oder rechts. • Befindet sich das Teilfenster an einer anderen Position, bewegt sich das Teilfenster in die Zielzeile. Der Schlagschatten beim Verschieben des Teilfensters zeigt seine neue Position an.	
Teilfenster verknüpfen	a. Wenn zwei Grafiken geöffnet sind, klicken Sie auf eine und aktivieren damit dieses Teilfenster. b. Klicken Sie auf **Explore > Link** und klicken Sie dann auf das andere Teilfenster.	
Verknüpfungen entfernen	Schließen Sie eines der Fenster. Klicken Sie auf **Explore > Remove Link.**	
Ein Fenster/Teilfenster löschen	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Window > Delete Pane.**	
Ein Fenster/Teilfenster sperren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Window > Lock Panes.**	
Ein Fenster/Teilfenster ausblenden	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Window > Hide Pane** .	

Tabelle 10-8 Diagramm-Optionen (Fortsetzung)

Um dies zu tun ...	verwenden Sie diese Menüoption ...	... oder klicken Sie auf dieses Symbol
Ein Fenster maximieren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Window > Maximize Pane.**	
Fenster/Teilfenster in Kacheln anordnen	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf **Window > Tile all Panes.**	

Die Y-Achse vergrößern

1. Setzen Sie den Mauszeiger links von der Y-Achse auf eine der Seiten der zu vergrößernden Fläche und ziehen Sie dann mit gedrückt gehaltener Maustaste vom Ausgangspunkt in vertikaler Richtung.

   Eine Box wird entlang der y-Achse gezeichnet und repräsentiert die neue Anzeige.

   Hinweis: Vorsicht, wenn Sie die Grundlinie vergrößern. Wenn Sie diese zu stark vergrößern, wird die Vergrößerungs-Box geschlossen.

2. Lassen Sie die Maustaste los, um das Diagramm in der neuen Größe zu zeichnen.

Die X-Achse vergrößern

Tipp! Um die Grafik wieder auf den ursprünglichen Maßstab zu bringen, doppelklicken Sie auf eine der Achsen. Um das gesamte Diagramm wieder auf den ursprünglichen Maßstab zu bringen, klicken Sie auf **Explore > Home Graph.**

1. Setzen Sie den Mauszeiger unter der X-Achse auf eine der Seiten der zu vergrößernden Fläche und ziehen Sie dann mit gedrückt gehaltener Maustaste vom Ausgangspunkt in horizontaler Richtung.
2. Lassen Sie die Maustaste los, um das Diagramm in der neuen Größe zu zeichnen.

Service- und Wartungsinformationen 11

Reinigen und warten Sie das System regelmäßig, um optimale Leistungen zu erzielen. Informationen über die Tuning-Häufigkeit siehe *Tabelle 11-1*.




WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Ermitteln Sie, ob vor der Reinigung oder Wartung eine Dekontamination des Massenspektrometers erforderlich ist. Eine Dekontamination sollte vor der Reinigung durchgeführt werden, wenn radioaktive Stoffe, biologische Arbeitsstoffe oder giftige Chemikalien in einem Massenspektrometer eingesetzt wurden.

Empfohlener Zeitplan für die Reinigung und Wartung

Tabelle 11-1 Wartungsaufgaben

Component	Häufigkeit	Aufgabe	Weitere Informationen...
Transferkapillare (Curtain plate)	Täglich	Reinigen	Siehe *Reinigen Sie die Transferkapillare auf Seite 96*.
Orifice plate (Vorderseite)	Täglich	Reinigen	Siehe *Reinigen Sie die Vorderseite der Messblende auf Seite 97*.
Orifice plate (Vorder- und Rückseite)	Je nach Bedarf	Reinigen	Kontaktieren Sie die lokale QMP oder einen AB SCIEX Servicemitarbeiter (FSE).
QJet® -Ionenführung und IQ0-Linse	Je nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an die lokale QMP oder einen FSE.
Q0 und IQ1 Linsen	Je nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an die lokale QMP oder einen FSE.
Instrumentoberflächen	Je nach Bedarf	Reinigen	Siehe *Reinigen der Oberflächen auf Seite 92*.
Auffangbehälter	Je nach Bedarf	Leeren	Siehe *Entleeren Sie den Quellenabgas-Auffangbehälter auf Seite 98*.
Vakuumpumpenöl	Je nach Bedarf	Prüfen und nachfüllen	Wenden Sie sich an die lokale QMP oder einen FSE.

Tabelle 11-1 Wartungsaufgaben (Fortsetzung)

Component	Häufigkeit	Aufgabe	Weitere Informationen...
Instrumentenluftfilter	Alle 6 Monate	Überprüfen und reinigen oder ersetzen	Wenden Sie sich an die lokale QMP oder einen FSE.
TurboIonSpray® und APCI-Elektroden	Je nach Bedarf	Überprüfen und reinigen oder ersetzen	
Koronaentladungsnadel	Je nach Bedarf	Ersetzen	

Für „Je nach Bedarf"-Aufgaben beachten Sie bitte diese Richtlinien:

- Reinigen Sie die QJet Ionenführung und Q0-Region, wenn sich die Empfindlichkeit des Systems verschlechtert.

  Tipp! Reinigen Sie den Q0-Bereich regelmäßig, um die Auswirkungen von Aufladung (ein erheblicher Verlust der Empfindlichkeit der betreffenden Ionen über einen kurzen Zeitraum) an den Quadrupolen und Linsen zu minimieren. Kontaktieren Sie eine QMP oder einen AB SCIEX Servicemitarbeiter.

- Reinigen Sie die Oberflächen des Massenspektrometers nach einem Verschütten oder wenn sie schmutzig werden.
- Leeren Sie den Auffangbehälter, bevor er voll wird.

Reinigen der Oberflächen

Reinigen Sie die äußeren Oberflächen des Massenspektrometers nach einem Verschütten oder wenn sie schmutzig werden.



WARNHINWEIS! Biogefährdung, toxisch-chemische Gefahren. Treffen Sie alle Sicherheitsvorkehrungen und befolgen Sie alle lokalen Bestimmungen und Richtlinien bei der Handhabung und Entsorgung des Vakuumpumpenöls. Gehen Sie vorsichtig vor, damit keine Flüssigkeiten auslaufen. Befolgen Sie die geltenden Maßnahmen, wenn es zum Auslaufen von Flüssigkeiten kommt.

1. Wischen Sie die Außenflächen mit einem weichen und feuchten Tuch mit warmem Seifenwasser ab.
2. Wischen Sie die Außenflächen mit einem weichen und feuchten Tuch ab, um alle Seifenreste zu entfernen.

Reinigen der Vorderseite

Reinigen Sie die Vorderseite des Massenspektrometers nach dem üblichen Reinigungsverfahren:

- damit ungeplante Ausfallzeiten minimiert werden.

- damit eine optimale Empfindlichkeit erhalten bleibt.
- um umfangreichere Reinigungen die einen Wartungstechniker erfordern zu vermeiden.

Wenn Kontamination auftritt, führen Sie zuerst eine routinemäßige Reinigung durch. Reinigen Sie bis zur und einschließlich der Vorderseite der Messblende (Orifice plate). Wenn eine routinemäßige Reinigung die Probleme mit der Empfindlichkeit nicht beheben kann, wird eine vollständige Reinigung notwendig sein.

Dieser Abschnitt enthält Anweisungen zur Durchführung einer routinemäßigen Reinigung ohne Unterbrechung des Vakuums und einer vollständigen Reinigung unter atmosphärischem Druck nach dem Belüften des Massenspektrometers.

Hinweis: Beachten Sie alle geltenden lokalen Vorschriften. Weitere Informationen über Gesundheits- und Sicherheitsvorschriften finden Sie im *Chemische Vorsichtsmaßnahmen auf Seite 8*.

Symptome bei Kontamination

Wenn eines der folgenden Symptome auftritt, ist das System eventuell kontaminiert:

- Deutlicher Empfindlichkeitsverlust
- Verstärktes Hintergrundrauschen
- Zusätzliche Peaks, die nicht Teil der Probe sind, erscheinen im vollständigen Scan oder in Survey Scan-Methoden.

Wenn Sie eines dieser Probleme bemerken, reinigen Sie die Vorderseite des Massenspektrometers.

Erforderliche Materialien

Hinweis: Kunden in den USA können die Telefonnummer 877-740-2129 für Bestellinformationen und bei Fragen anrufen. Internationale Kunden gehen bitte zu www.absciex.com/contact-us.

- Puderfreie Handschuhe (Neopren- bzw. Nitrilhandschuhe werden empfohlen)
- Schutzbrillen
- Laborkittel
- Frisches, hochwertiges (reines) Wasser (mindestens 18 MΩ entionisiertes Wasser (DI Wasser) oder ultra-reines Wasser in HPLC-Qualität). Gebrauchtes Wasser kann Verunreinigungen enthalten, die das Massenspektrometer weiter verunreinigen können.
- MS-reines Methanol, Isopropanol (2-Propanol) oder Acetonitril
- Reinigungslösung. Verwenden Sie entweder:
    - 100% Methanol
    - 100% Isopropanol
    - 50:50 Acetonitril:Wasser-Lösung (frisch zubereitet)
    - 50:50 Acetonitril:Wasser mit 0,1%iger Essigsäurelösung (frisch zubereitet)
- Sauberes 1-l- oder 500-ml-Becherglas für die Vorbereitung der Reinigungslösungen

- 1-l-Becherglas zum Auffangen von verwendetem Lösungsmittel
- Behälter für organischen Lösemittelabfall
- Fusselfreie Wischtücher. Siehe *Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel auf Seite 94*.
- (Optional) Polyestertupfer

Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel

Beschreibung	**Artikelnummer**
Kleiner Polyestertupfer (thermisch gebunden) Im Reinigungs-Kit erhältlich.	1017396
Fusselfreies Tuch (11 cm x 21 cm, 4,3 Zoll x 8,3 Zoll). Im Reinigungs-Kit erhältlich.	018027
Q0-Reinigungswerkzeug zum Reinigen der Spitze des Q0-Stabsatzes. Im Reinigungs-Kit erhältlich.	1028234
Spezielle QJet® Reinigungsbürste für Ionenführung (spitz zulaufend). Im Reinigungs-Kit erhältlich.	5020895
Alconox-Packungen. Im Reinigungs-Kit erhältlich.	5020893
Reinigungs-Kit. Enthält den kleinen Polyestertupfer, fusselfreie Tücher, Q0-Reinigungswerkzeug, spitz zulaufende QJet Reinigungsbürste für Ionenführung und Alconox-Packungen.	5020763

Beste Vorgehensweise



WARNHINWEIS! Toxisch-chemische Gefahren. Befolgen Sie alle Sicherheitshinweise bei der Handhabung, Lagerung und Entsorgung von Chemikalien.





WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Ermitteln Sie, ob vor der Reinigung oder Wartung eine Dekontamination des Massenspektrometers erforderlich ist. Eine Dekontamination sollte vor der Reinigung durchgeführt werden, wenn radioaktive Stoffe, biologische Arbeitsstoffe oder giftige Chemikalien in einem Massenspektrometer eingesetzt wurden.



WARNHINWEIS! Umweltgefährdung. Entsorgen Sie die Systemkomponenten nicht mit dem Hausmüll. Befolgen Sie die geltenden Verfahren für die Entsorgung von Komponenten.

- Tragen Sie bei der Reinigung immer saubere, puderfreie Handschuhe.
- Ziehen Sie nach der Reinigung der Massenspektrometer-Komponenten und vor dem Zusammenbau ein neues, sauberes Paar Handschuhe an.

- Verwenden Sie keine Reinigungsmittel, die nicht in diesem Verfahren angegeben sind.
- Wenn möglich, bereiten Sie die Reinigungslösungen erst kurz vor Beginn der Reinigung zu.
- Zubereitung und Verwahrung aller organischen Lösungen und Lösungen mit organischen Komponenten nur in sehr sauberen Gläsern. Benutzen Sie niemals Flaschen aus Plastik. Verunreinigungen können aus diesen Flaschen auslaugen und weitere Verunreinigung des Massenspektrometers verursachen.
- Achten Sie darauf, dass nur der mittlere Bereich des Wischtuchs mit der Oberfläche des Massenspektrometers in Berührung kommt. Schnittkanten können Fasern hinterlassen.

Tipp! Wickeln Sie das Wischtuch um einen thermisch gebundenen Polyestertupfer.

Abbildung 11-1 Beispiel: Zusammenfalten des Wischtuchs



- Um eine Kreuzkontamination zu vermeiden, berühren Sie die Oberfläche nur einmal mit dem Wischtuch oder dem Tupfer und werfen Sie diese dann weg.
- Bei größeren Teilen der Vakuum-Schnittstelle, wie den Transferkapillaren, können mehrere Reinigungen mit mehreren Wischtüchern erforderlich sein.
- Zur Vermeidung einer Kontamination der Reinigungslösung gießen Sie die Lösung auf das Tuch oder den Tupfer.
- Befeuchten Sie das Tuch oder den Tupfer nur leicht, wenn Sie Wasser oder Reinigungsmittel auftragen. Wasser kann leichter als organische Lösungsmittel dazu führen, dass Wischtücher verschleißen und Rückstände auf dem Massenspektrometer hinterlassen.
- Wischen Sie mit dem Tuch nicht über die Öffnungen. Reiben Sie um die Öffnungen herum, damit keine Fasern des Wischtuches in das Massenspektrometer gelangen.
- Stecken Sie die Bürste nicht in die Öffnung von Transferkapillare oder Messblende.

Vorbereitung des Massenspektrometers

Die folgenden Warnhinweise beziehen sich auf alle Verfahren in diesem Kapitel.



WARNHINWEIS! Gefahr durch heiße Oberfläche. Lassen Sie die Ionenquelle vor Beginn der Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten abkühlen. Die Oberflächen der Ionenquelle und die Komponenten der Vakuum-Schnittstelle werden beim Betrieb heiß.

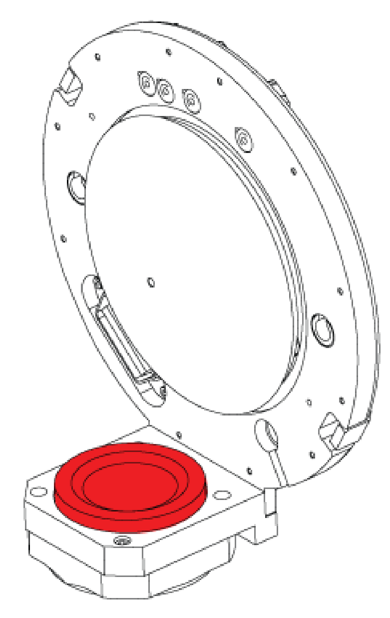
Hinweis: Bei Massenspektrometern mit einer NanoSpray® -Ionenquelle ist eventuell eine vollständige Reinigung erforderlich, um beste Ergebnisse zu liefern. Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).

1. Deaktivieren Sie das Hardwareprofil. Siehe *Systemhandbuch*.
2. Entfernen Sie die Ionenquelle. Siehe das Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.

VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Lassen Sie nichts in den Ionenquellenablauf fallen, wenn die Ionenquelle entfernt wurde.

Lagern Sie die Ionenquelle bei Nichtgebrauch zum Schutz vor Beschädigung und zum Erhalt der Betriebsbereitschaft an einem sicheren Ort.

Abbildung 11-2 Ionenquellenablauf auf der Vakuum-Schnittstelle

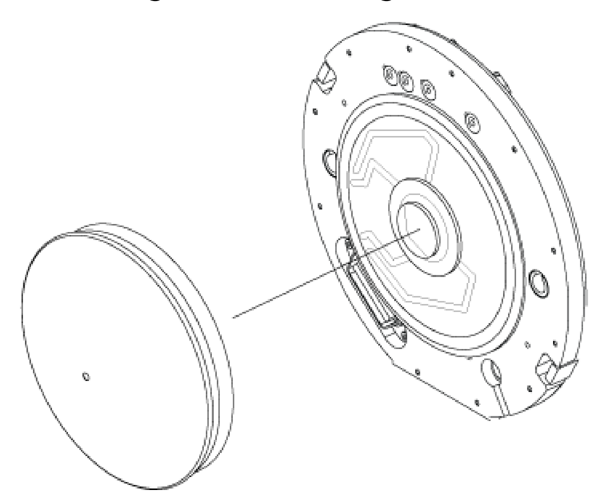


Reinigen Sie die Transferkapillare

VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Legen Sie die Transferkapillare oder die Messblende nicht auf der Öffnungsspitze ab. Achten Sie darauf, dass die konische Seite der Transferkapillare nach oben zeigt.

1. Entfernen Sie die Transferkapillare und legen Sie sie mit der konischen Seite nach oben auf eine saubere, stabile Oberfläche.

Abbildung 11-3 Entfernung der Transferkapillare



VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Stecken Sie keinen Draht und keine Metallbürste in die Öffnung von Transferkapillare, Messblende oder der Schnittstellenheizung, um eine Beschädigung der Öffnung zu vermeiden.

2. Befeuchten Sie ein fusselfreies Wischtuch mit reinem Wasser und reinigen Sie dann beide Seiten der Transferkapillare. Verwenden Sie bei Bedarf mehrere Wischtücher.
3. Wiederholen Sie diesen Schritt *2* mit der Reinigungslösung.
4. Reinigen Sie die Blende mit einem feuchten Tuch oder einem kleinem Polyestertupfer.
5. Warten Sie, bis die Transferkapillare trocken sind.
6. Untersuchen Sie die Transferkapillare auf Lösungsmittelflecken oder Flusen und entfernen Sie mit einem sauberen, leicht feuchten und fusselfreien Tuch sämtliche Rückstände.

Hinweis: Ständige Flecken- oder Filmbildung sind ein Anzeichen für verunreinigte Lösungsmittel.

Reinigen Sie die Vorderseite der Messblende

Wenn Sie die Standard-Messblende mit abnehmbarer Schnittstellenheizung reinigen, entfernen Sie die Schnittstellenheizung nicht. Die Oberflächenreinigung der Schnittstellenheizung ist für die routinemäßige Reinigung ausreichend.

VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Stecken Sie keinen Draht und keine Metallbürste in die Öffnung von Transferkapillare, Messblende oder der Schnittstellenheizung, um eine Beschädigung der Öffnung zu vermeiden.

Das Massenspektrometer wieder in Betrieb nehmen

1. Installieren Sie die Transferkapillare an dem Massenspektrometer.
2. Installieren Sie die Ionenquelle an dem Massenspektrometer. Vergessen Sie nicht, die Ionenquelle durch drehen der Riegel nach unten in die verriegelte Position zu befestigen.
3. Hardwareprofil aktivieren.

Entleeren Sie den Quellenabgas-Auffangbehälter

Leeren Sie den Quellenabgas-Auffangbehälter, bevor er voll ist.

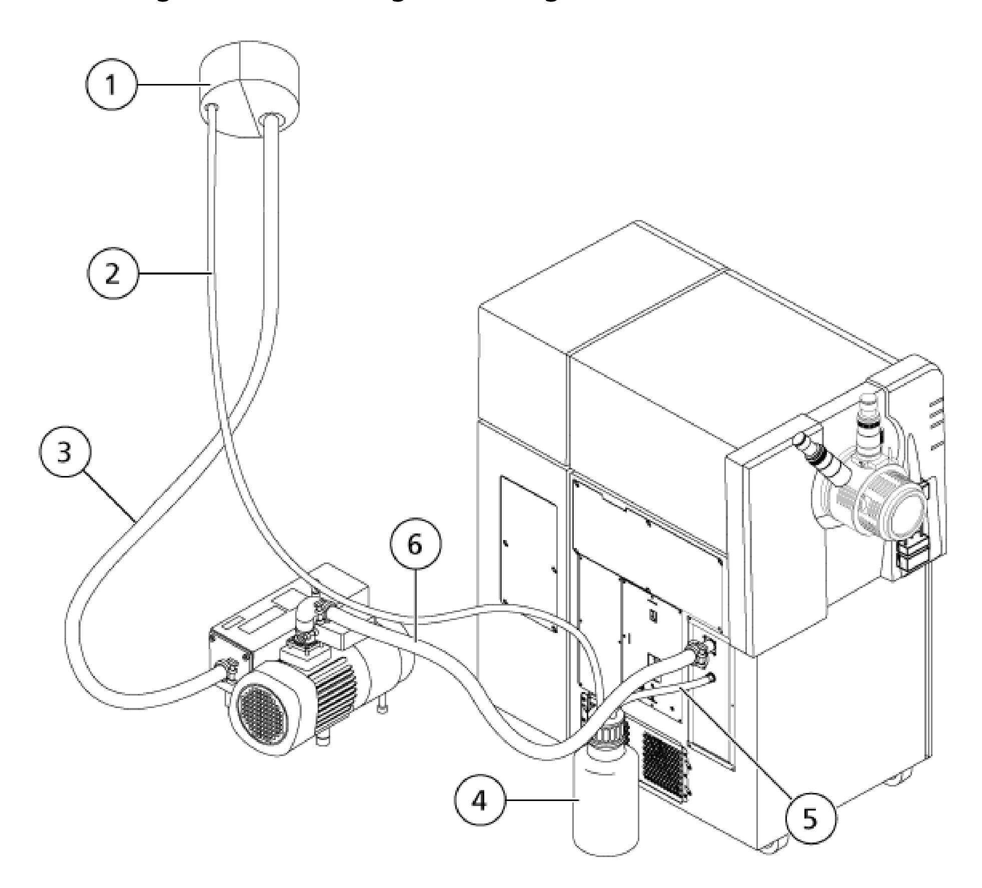




WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Entsorgen Sie Gefahrstoffe in entsprechend gekennzeichneten Behältern. Potenzielles Risiko von Personenschäden, wenn die richtige Handhabung und Entsorgung von gefährlichem Material nicht befolgt wird.

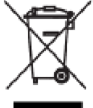
1. Lösen Sie die Klammern, die die Schläuche mit dem Deckel des Quellenabgas-Auffangbehälters verbinden.
2. Trennen Sie die Schläuche vom Deckel.
3. Heben Sie den Auffangbehälter aus dem Halter, falls erforderlich.
4. Entfernen Sie den Auffangbehälter vom Deckel.
5. Leeren Sie den Auffangbehälter und entsorgen Sie den Abfall.
6. Installieren Sie die Kappe auf dem Behälter und setzen Sie den Behälter in den Halter ein.
7. Verbinden Sie die Schläuche mit dem Deckel und sichern Sie sie fest mit Klemmen.

Abbildung 11-4 Quellenabgas-Auffangbehälter



Position	Beschreibung
1	Entlüftungsanschluss
2	Quellenabgas-Ablaufschläuche: 2,5 cm (1,0 Zoll) Innendurchmesser (ID)
3	Vakuumpumpen-Abgasschlauch: 3,2 cm (1,25 Zoll) Innendurchmesser.
4	Quellenabgas-Auffangbehälter (In dieser Zeichnung ist der Auffangbehälter mit Kappe auf der Rückseite des Massenspektrometers zu sehen, um Anschlusspunkte sichtbar zu machen. Der Auffangbehälter befindet sich an der Seite des Massenspektrometers im Auffangbehälter-Halter. Vergewissern Sie sich, dass das der Behälter gesichert ist, um ein Verschütten zu vermeiden.)
5	Anschluss zum Massenspektrometer: 1,6 cm (0,625 Zoll) ID
6	Vakuum-Eingangsschlauch der Vakuumpumpe

Lagerung und Handhabung



WARNHINWEIS! Umweltgefährdung. Entsorgen Sie die Systemkomponenten nicht mit dem Hausmüll. Befolgen Sie die geltenden Verfahren für die Entsorgung von Komponenten.

Wenn das Massenspektrometer für längere Zeit gelagert oder für den Transport vorbereitet werden soll, kontaktieren Sie einen AB SCIEX-Außendienstmitarbeiter, um Informationen zur Stilllegung zu erhalten. Um das Massenspektrometer vom Stromnetz zu trennen, ziehen Sie den Netzstecker aus der Steckdose.

Hinweis: Das System muss zwischen –30 °C und +60 °C (–22 °F und 140 °F) transportiert und gelagert werden. Lagern Sie das System in einer Höhe von unter 2000 m (6562 ft) über dem Meeresspiegel.

Fehlerbehebung 12

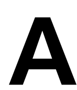
Dieses Kapitel enthält grundlegende Informationen zur Beseitigung einfacher Systemfehler. Bestimmte Tätigkeiten dürfen nur von AB SCIEX geschulten qualifizierten Wartungstechnikern im Labor durchgeführt werden. Für komplizierte Störungsbeseitigungen wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).

Tabelle 12-1 Systemfehler

Fehler	Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
Empfindlichkeitsverlust	Instrument oder Ionenquelle müssen eingeregelt und optimiert werden	Siehe *Betriebsanleitung – Tunen und Kalibrieren auf Seite 48*. Analyst® TF-Software Hilfe-System
	Schmutzige Transferkapillare	Siehe *Reinigen Sie die Transferkapillare auf Seite 96*.
	Schmutzige Messblende	Siehe *Reinigen Sie die Vorderseite der Messblende auf Seite 97*.
	QJet® -Ionenführung, Skimmer, Q0 oder IQ0 verschmutzt	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE) oder die lokale QMP.
Häufige oder sehr starke Verschmutzung der QJet-Ionenführung	Curtain Gas™ -Volumenstrom (CUR) ist zu niedrig.	Überprüfen Sie die Einstellung des Parameters CUR und erhöhen Sie ihn, falls erforderlich.
Geringer Vakuumdruck	Niedriger Ölstand in der Vakuumpumpe.	Überprüfen Sie den Ölstand in der Vakuumpumpe und füllen Öl nach, falls erforderlich. Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE) oder die lokale QMP.

Für Verkauf, technische Unterstützung oder Service wenden Sie sich bitte an einen Außendienstmitarbeiter (FSE) oder besuchen Sie die AB SCIEX-Website unter www.absciex.com mit Kontaktinformationen.

Empfohlene Kalibrierungsionen



In den folgenden Tabellen sind die von AB SCIEX empfohlenen Normen für die Kalibrierung des AB SCIEX TripleTOF® 5600 Systems aufgeführt. Informationen zu Tuning-Lösungen siehe *Betriebsanleitung – Tunen und Kalibrieren auf Seite 48*.

Tabelle A-1 Q1 PPG positive Kalibrierungsionen

Massen					
59,04914	233,17472	442,33740	674,50484	906,67228	1196,88158

Tabelle A-2 Q1 PPG negative Kalibrierungsionen

Massen				
44,99819	411,25991	585,38549	933,63665	1165,80409

Tabelle A-3 APCI positive Kalibrierlösung und ESI positive Kalibrierlösung: TOF MS

TOF MS	Massen
Amino-Heptansäure	146,11756
Amino-dPEG 4-Säure	266,15981
Clomipramin	315,16225
Amino-dPEG 6-Säure	354,21224
Amino-dPEG 8-Säure	442,26467
Reserpin	609,28066
Amino-dPEG 12-Säure	618,36953
Hexakis(2,2,3,3-tetrafluoropropoxy) Phosphazen	922,0098
Hexakis(1H,1H,5H-octafluoropentoxy) Phosphazen	1521,97148

Tabelle A-4 APCI positive Kalibrierlösung und ESI positive Kalibrierlösung: MSMS (Clomipramin)

MSMS (Clomipramin)	Massen
C_3H_8N	58,0651
$C_5H_{12}N$	86,0964
$C_{16}H_{14}N$	220,1121
$C_{14}H_{10}NCl$	227,0496
$C_{17}H_{17}N$	235,1356
$C_{15}H_{13}NCl$	242,0731
$C_{17}H_{17}ClN$	270,1044
$C_{19}H_{23}ClN_2$	315,16225

Tabelle A-5 APCI negative Kalibrierlösung und ESI negative Kalibrierlösung: TOF MS

TOF MS	Massen
7-Amino-Heptansäure	144,103
Amino-dPEG 4-Säure	264,14526
Sulfinpyrazonfragment	277,09825
Amino-dPEG 6-Säure	352,19769
Sulfinpyrazon	403,11219
Amino-dPEG 8-Säure	440,25012
Amino-dPEG 12-Säure	616,35498
Amino-dPEG 16-Säure	792,45984

Tabelle A-6 APCI negative Kalibrierlösung und ESI negative Kalibrierlösung: MSMS (Sulfinpyrazon)

MSMS (Sulfinpyrazon)	Massen
C_6H_5O	93,0344
C_6H_5OS	125,0067
$C_{10}H_8NO$	158,06114
$C_{17}H_{13}N_2O_2$	277,0983
$C_{23}H_2ON_2OS_3$	403,11219

Tabelle A-7 APCI negative Kalibrierlösung und ESI negative Kalibrierlösung: MSMS (Sulfinpyrazonfragment)

MSMS (Sulfinpyrazonfragment)	Massen
C_6H_5	77,03967
C_8H_6N	116,0506
C_9H_8N	130,0662
$C_{10}H_8NO$	158,0611
$C_{11}H_8N_2O_2$	200,0591
$C_{15}H_9N_2$	217,0771
$C_{16}H_{13}N_2O$	249,1033
$C_{17}H_{13}N_2O_2$	277,09825

Exakte Massen und chemische Formeln

B

PPG

Tabelle B-1 enthält die exakten monoisotopischen Massen und geladenen Spezies (positive und negative), die bei den PPG- (Propylenglykol-) Kalibrierlösungen beobachtet werden. Die Massen und Ionen wurden mit der Formel $M = H[OC_3H_6]_nOH$ berechnet, während für die MS/MS-Fragmente der positiven Ionen die Formel $[OC_3H_6]_n(H^+)$ verwendet wurde. In allen Berechnungen war H = 1,007825, O = 15,99491, C = 12,00000 und N = 14,00307.

Hinweis: Verwenden Sie bei der Durchführung von Kalibrierungen mit PPG-Lösungen den korrekten Isotopenmaximalwert.

Tabelle B-1 Exakte PPG-Massen

n	Exakte Masse (M)	$(M + NH_4)^+$	MS/MS-Fragmente	$(M + NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
1	76,05242	94,08624	59,04914	56,06003	121,05061
2	134,09428	152,12810	117,09100	85,08096	179,09247
3	192,13614	210,16996	175,13286	114,10189	237,13433
4	250,17800	268,21182	233,17472	143,12282	295,17619
5	308,21986	326,25368	291,21658	172,14375	353,21805
6	366,26172	384,29554	349,25844	201,16468	411,25991
7	424,30358	442,33740	407,30030	230,18561	469,30177
8	482,34544	500,37926	465,34216	259,20654	527,34363
9	540,38730	558,42112	523,38402	288,22747	585,38549
10	598,42916	616,46298	581,42588	317,24840	643,42735
11	656,47102	674,50484	639,46774	346,26933	701,46921
12	714,51288	732,54670	697,50960	375,29026	759,51107
13	772,55474	790,58856	755,55146	404,31119	817,55293
14	830,59660	848,63042	813,59332	433,33212	875,59479
15	888,63846	906,67228	871,63518	462,35305	933,63665
16	946,68032	964,71414	929,67704	491,37398	991,67851

Tabelle B-1 Exakte PPG-Massen (Fortsetzung)

n	Exakte Masse (M)	$(M + NH_4)^+$	MS/MS-Fragmente	$(M + NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
17	1004,72218	1022,75600	987,71890	520,39491	1049,72037
18	1062,76404	1080,79786	1045,76076	549,41584	1107,76223
19	1120,80590	1138,83972	1103,80262	578,43677	1165,80409
20	1178,84776	1196,88158	1161,84448	607,45770	1223,84595
21	1236,88962	1254,92344	1219,88634	636,47863	1281,88781
22	1294,93148	1312,96530	1277,92820	665,49956	1339,92967

Reserpin

Reserpin ($C_{33}H_{40}N_2O_9$)

Tabelle B-2 Exakte Massen von Reserpin

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion $C_{33}H_{41}N_2O_9$	609,28066
Fragment $C_{23}H_{30}NO_8$	448,19659
Fragment $C_{23}H_{29}N_2O_4$	397,21218
Fragment $C_{22}H_{25}N_2O_3$	365,18597
Fragment $C_{13}H_{18}NO_3$	236,12812
Fragment $C_{10}H_{11}O_4$	195,06519
Fragment $C_{11}H_{12}NO$	174,09134

Taurocholsäure

Taurocholsäure ($C_{26}H_{45}NO_7S$)

Tabelle B-3 Exakte Massen von Taurocholsäure

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion $C_{26}H_{44}NO_7S$	514,28440
Fragment $C_2H_3O_3S$	106,98084
Fragment $C_2H_6NO_3S$	124,00739
Fragment SO_3	79,95736

TOF-Kalibrierlösung

Tabelle B-4 TOF-Kalibrierlösung, exakte Massen

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion Cs^{+}	132,90488
Molekulares Ion Peptid ALILTLVS	829,53933

Symbole der Werkzeugleiste C

Weitere Informationen zu Symbolen der Werkzeugleiste finden Sie im *Advanced User Guide*.

Tabelle C-1 Symbole der Werkzeugleiste

Symbol	Name	Beschreibung
	New Subproject	Erstellt ein Teilprojekt. **Teilprojekte können später im Prozess nur dann erstellt werden, wenn das Projekt ursprünglich mit Teilprojekten erstellt wurde.**
	Copy Subproject	Kopiert einen Teilprojekt-Ordner. Teilprojekte können nur aus einem anderen Projekt kopiert werden, das bestehende Teilprojekte besitzt. Wenn die gleichen Ordner sowohl auf Projekt- als auch Teilprojekt-Ebene vorhanden sind, verwendet die Software die Ordner der Projektebene.

Tabelle C-2 Acquisition Method Editor-Symbole

Symbol	Name	Beschreibung
	Mass Spec	Zeigt die **MS**-Registerkarte im **Acquisition Method** Editor an.
	Period	Durch Klicken der rechten Maustaste kann man ein Experiment, eine **IDA-Kriterienebene** hinzufügen oder die Periode löschen.
	Autosampler	Ruft die Registerkarte **Autosampler Properties** auf.
	Syringe Pump	Ruft die Registerkarte **Syringe Pump Properties** auf.
	Column Oven	Ruft die Registerkarte **Column Oven Properties** auf.
	Valve	Ruft die Registerkarte **Valve Properties** auf.
	DAD	Öffnet den **DAD Method Editor**. Siehe *DAD-Daten anzeigen auf Seite 84*.
	ADC	Ruft die Registerkarte **ACD Properties** auf. Siehe *ADC-Daten anzeigen auf Seite 77*.

Tabelle C-3 Symbole im Aufnahmemodus

Symbol	Name	Beschreibung
	View Queue	Zeigt die Proben-Warteschlange an.
	Instrument Queue	Zeigt eine entfernt liegende Instrumentenstation an.
	Status for Remote Instrument	Zeigt den Status eines entfernt liegenden Geräts an.
	Start Sample	Startet die Probe in der Warteschlange.
	Stop Sample	Stoppt die Probe in der Warteschlange.
	Abort Sample	Beendet die Probenaufnahme während der Verarbeitung dieser Probe.
	Stop Queue	Stoppt die Warteschlange, bevor es die Verarbeitung aller Proben abgeschlossen hat.
	Pause Sample Now	Fügt eine Pause in die Warteschlange ein.
	Insert Pause before Selected Sample(s)	Fügt eine Pause vor einer bestimmten Probe ein.
	Continue Sample	Setzt die Aufnahme der Probe fort.
	Next Period	Startet eine neue Periode.
	Extend Period	Verlängert den aktuellen Zeitabschnitt.
	Next Sample	Stoppt die Aufnahme der aktuellen Probe und beginnt mit der Aufnahme der nächsten Probe.
	Equilibrate	Wählt die zum Äquilibrieren der Geräte verwendete Methode aus. Es sollte die gleiche Methode sein, wie jene die bei der ersten Probe in der Warteschlange verwendet wird.
	Standby	Schaltet das Gerät in den **Standby**-Modus.
	Ready	Schaltet das Gerät in den **Ready**-Modus.
T	Reserve Instrument for Tuning	Stellt das Massenspektrometer für Tuning und Kalibrierung bereit.

Tabelle C-3 Symbole im Aufnahmemodus (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
		Startet den **Method Wizard**.
	Purge Modifier	Startet die Spülung des Modifikators aus der Modifier-Pumpe.

Tabelle C-4 Modus-Symbole „Tune and Calibrate"

Symbol	Name	Beschreibung
	Kalibrieren über ein Spektrum	Öffnet das Dialogfeld **Mass Calibration Option** und verwendet das aktive Spektrum zum Kalibrieren des Massenspektrometers.
	Manual Tune	Klicken Sie hier, um den **Manual Tune Editor** zu öffnen.
	Instrument Optimization	Überprüft die Leistung des Geräts, passt die Massenkalibrierung an oder passt die Massenspektrometer-Einstellungen an.
	View Queue	Zeigt die Proben-Warteschlange an.
	Instrument Queue	Zeigt eine entfernt liegende Instrumentenstation an.
	Status for Remote Instrument	Zeigt den Status eines entfernt liegenden Geräts an.
	Reserve Instrument for Tuning	Stellt das Instrument für Tuning und Kalibrierung bereit.
	Purge Modifier	Klicken Sie hier, um den Modifikator aus der Modifikator-Pumpe zu reinigen oder zu entleeren.

Tabelle C-5 Kurzinformation durchsuchen: Chromatogramme und Spektrum

Symbol	Name	Beschreibung
	Open Data File	Öffnet Dateien.
	Show Next Sample	Geht zur nächsten Probe.
	Show Previous Sample	Geht zur vorhergehenden Probe.
	GoTo Sample	Öffnet das Dialogfeld **Select Sample**.

Tabelle C-5 Kurzinformation durchsuchen: Chromatogramme und Spektrum (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	List Data	Zeigt die Daten in Tabellenform an.
	TIC anzeigen	Generiert ein TIC von einem Spektrum
	Dialogfeld Extract Using	Extrahiert Ionen durch Auswählen von Massen.
	Show Base Peak Chromatogram	Generiert ein BPC.
	Show Spectrum	Generiert ein Spektrum aus einem TIC.
	Copy Graph to new Window	Kopiert das aktive Diagramm in ein neues Fenster.
	Baseline Subtract	Öffnet das Dialogfeld **Baseline Subtract**.
	Schwellenwert	Passt den Schwellenwert an.
	Noise Filter	Zeigt das Dialogfeld **Noise Filter Options** an, der verwendet werden kann, um die Mindestbreite eines Peaks zu definieren. Signale unterhalb dieser Mindestbreite werden als Rauschen betrachtet.
	Show ADC	Zeigt ADC-Daten an.
	Show File Info	Zeigt die experimentellen Bedingungen, die zur Sammlung der Daten verwendet wurden.
	Add arrows	Fügt Pfeile auf der X-Achse des aktuellen Diagramms ein.
	Remove all arrows	Entfernt Pfeile von der X-Achse des aktuellen Diagramms.
	Offset Graph	Kompensiert den kleinen Zeitunterschied zwischen der Aufzeichnung der ADC-Daten und der Erfassung der Massenspektrometer-Daten. Dies ist nützlich, wenn Sie Diagrammen zum Vergleich überlagern
	Force Peak Labels	Kennzeichnet alle Peaks.
	Expand Selection By	Bestimmt den Vergrößerungsfaktor für einen Teil des Diagramms, der genauer untersucht werden soll.
	Clear ranges	Bringt die vergrößerte Auswahl wieder auf die normale Ansicht.

Tabelle C-5 Kurzinformation durchsuchen: Chromatogramme und Spektrum (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	Set Selection	Definiert Anfangs- und Endwerte für eine Auswahl. Diese Funktion ermöglicht eine genauere Auswahl als dies durch das Markieren des Bereiches mit dem Cursor möglich ist.
	Normalisieren auf Max	Skaliert ein Diagramm auf das Maximum, sodass der intensivste Peak auf die Originalgröße skaliert wird, egal, ob er sichtbar ist oder nicht.
	Show History	Zeigt eine Zusammenfassung der Datenverarbeitungsschritte an, die mit einer bestimmten Datei ausgeführt wurden, wie z. B. Glättung, Subtraktion, Kalibrierung und Rauschfilterung.
	Open Compound Database	Öffnet die Datenbank für chemische Verbindungen.
	Set Threshold	Passt den Schwellenwert an.
	Show Contour Plot	Zeigt ausgewählte Daten entweder als Spektrumdiagramm oder als XIC. Zusätzlich gilt für Daten, die durch DAD aufgenommen wurden, dass ein Konturdiagramm ausgewählte Daten entweder als DAD-Spektrum oder XWC zeigen kann.
	Show DAD TWC	Generiert ein TWC des DAD-Spektrums.
	Show DAD Spectrum	Generiert ein DAD-Spektrum.
	Extract Wavelength	Extrahiert bis zu drei Wellenlängenbereiche von einem DAD-Spektrum und zeigt ein XWC.

Tabelle C-6 Ergebnistabellen-Symbole

Symbol	Name	Beschreibung
	Sort Ascending by Selection	Sortiert die ausgewählte Spalte nach aufsteigenden Werten.
	Sort Descending by Selection	Sortiert die markierte Spalte nach absteigenden Werten.
	Lock oder Unlock Column	Sperrt oder entsperrt die markierte Spalte. Eine gesperrte Spalte kann nicht verschoben werden.
	Metric Plot by Selection	Erstellt für die markierte Spalte eine metrische Kurve.
	Show all Samples	Zeigt alle Proben in der **Ergebnistabelle** an.

Tabelle C-6 Ergebnistabellen-Symbole (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	Delete Formula Column	Löscht Formelspalten.
	Report Generator	Öffnet die Bericht-Software.

Revisionen

Dokumentennummer	Grund für Änderung	Datum
D5033331 A	Erste Veröffentlichung des Dokuments.	Mai 2012
RUO-IDV-05-1193-DE-A	Neue Vorlage angewendet. Hinsichtlich Analyst® TF 1.7. Aktualisierte Bildschirmfotos für Windows 7. Für CE- und CES-Parameter zutreffende geänderte Scan-Typen.	Juli 2014

Index

E

F

G

Q

R

S

